RAPPORT D'ÉTUDE 31/01/2008

N°DRC-08-86031-00620A

Guide méthodologique

Recommandations relatives au choix entre modèle analytique et numérique dans le cadre de l'étude du transfert de polluants dans les sols et les eaux souterraines



Guide méthodologique

Recommandations relatives au choix entre modèle analytique et numérique dans le cadre de l'étude du transfert de polluants dans les sols et les eaux souterraines

Client :

Ministère de l'Écologie, du Développement et de l'Aménagement Durables (MEDAD).

PRÉAMBULE

Le présent rapport a été établi sur la base des informations fournies à l'INERIS, des données (scientifiques ou techniques) disponibles et objectives et de la réglementation en vigueur.

La responsabilité de l'INERIS ne pourra être engagée si les informations qui lui ont été communiquées sont incomplètes ou erronées.

Les avis, recommandations, préconisations ou équivalent qui seraient portés par l'INERIS dans le cadre des prestations qui lui sont confiées, peuvent aider à la prise de décision. Etant donné la mission qui incombe à l'INERIS de par son décret de création, l'INERIS n'intervient pas dans la prise de décision proprement dite. La responsabilité de l'INERIS ne peut donc se substituer à celle du décideur.

Le destinataire utilisera les résultats inclus dans le présent rapport intégralement ou sinon de manière objective. Son utilisation sous forme d'extraits ou de notes de synthèse sera faite sous la seule et entière responsabilité du destinataire. Il en est de même pour toute modification qui y serait apportée.

L'INERIS dégage toute responsabilité pour chaque utilisation du rapport en dehors de la destination de la prestation.

	Rédaction	Vérification	Approbation
NOM	F. QUIOT	C. ROLLIN et O. BOUR	J. BUREAU
Qualité	Ingénieur à l'unité "Déchets et Sites Pollués", Direction des Risques Chroniques	Ingénieurs à l'unité "Déchets et Sites Pollués", Direction des Risques Chroniques	Responsable de l'unité "Déchets et Sites Pollués", Direction des Risques Chroniques
Visa	F. Quiot		J. Bureau

TABLE DES MATIERES

NOMENCLATURE **8**

CONTEXTE ET OBJECTIFS **9**

1. RAPPELS LIÉS À LA MODÉLISATION DES TRANSFERTS AU SEIN DU MILIEU POREUX **11**

1.1 Définitions 11

1.2 Phénomènes associés au transport de polluants au sein du milieu poreux 16

1.3 Objectifs de la modélisation 17

1.4 Principales étapes à considérer lors de la réalisation d'une modélisation 18

2. OUTILS EXISTANTS **23**

3. INTERCOMPARAISON **26**

3.1 Rappels quant au CR3 et aux travaux réalisés 26

3.2 BIOCHLOR 29

3.2.1 Remarque préliminaire concernant BIOCHLOR (et BIOSCREEN) 29

3.2.2 Présentation de BIOCHLOR 30

3.2.3 Réalisation d'un modèle BIOCHLOR 30

3.2.4 Résultats de BIOCHLOR 37

3.2.5 Remarques relatives à l'utilisation de BIOCHLOR dans le cadre du CR3 46

3.3 NAS 47

3.3.1 Présentation de NAS 47

3.3.2 Réalisation d'un modèle NAS 48

3.3.3 Résultats NAS 48

3.3.4 Remarques relatives à l'utilisation de NAS dans le cadre du CR3 51

3.4 Comparaison avec modèles numériques et résultats de la seconde phase d'intercomparaison du CR3 52

4. SYNTHÈSE ET RECOMMANDATIONS RELATIVES AU CHOIX D'UN OUTIL DE CALCUL **58**

CONCLUSION **61**

REFERENCES **63**

LISTE DES ANNEXES **67**

LISTE DES FIGURES

Figure 1 : Schématisation d'une simulation réalisée par un modèle analytique (exemple BIOCHLOR) 12
Figure 2 : Exemple de maillage pour un modèle numérique aux DF (réalisé sous MODFLOW 2000 - USGS)... 13
Figure 3 : Schéma de résolution aux différences finies (exemples : MODFLOW, MARTHE) 14
Figure 4 : Premier exemple de modèle sous Excel (capture d'écran BIOCHLOR 2.2 – US EPA, 2002) 15
Figure 5 : Second exemple de modèle sous Excel (capture d'écran NAS 2.2.0 – VirginiaTec, US EPA, US Navy, 2006) 15
Figure 6 : Schématisation de la démarche globale de modélisation..................... 21
Figure 7 : Carte du site (coordonnées UTM) (Rollin et Bour, 2002)...................... 28
Figure 8 : Définition de la zone source (homogène à gauche et hétérogène à droite) 35
Figure 9 : Résultats des simulations pour le modèle BIOCHLOR 1 à 1547 j de simulation 39
Figure 10 : Résultats des simulations pour le modèle BIOCHLOR 1 à 1801 j de simulation 39
Figure 11 : Résultats des simulations pour le modèle BIOCHLOR 2 à 1801 j de simulation 41
Figure 12 : Résultats des simulations pour le modèle BIOCHLOR 2 à 2170 j de simulation 41
Figure 13 : Résultats des simulations pour le modèle BIOCHLOR 2 à 3521 j de simulation 42
Figure 14 : Résultats des simulations pour le modèle BIOCHLOR 3 à 1801 j de simulation 44
Figure 15 : Résultats des simulations pour le modèle BIOCHLOR 3 à 3521 j de simulation 44
Figure 16 : Méthodologie retenue, exemple PL – NAS... 49
Figure 17 : Comparaison du calage des concentrations en PCE sur 6 piézomètres répartis d'amont vers l'aval 56
Figure 18 : Comparaison du calage des concentrations en TCE sur 6 piézomètres répartis d'amont vers l'aval 56
Figure 19 : Comparaison du calage des concentrations en DCE sur 6 piézomètres répartis d'amont vers l'aval 57

LISTE DES TABLEAUX

Tableau 1 : Principaux mécanismes de transport physico-chimiques et paramètres associés à la propagation des polluants dans les aquifères (notamment d'après Lemière & al. 2001 ; Wiedemeier & al. 1998)................16

Tableau 2 : Liste non exhaustive d'outils de modélisation disponibles fin décembre 2007 23

Tableau 3 : Principales données d'entrée (Rollin, 2003) 29

Tableau 4 : Valeurs et domaines de variation retenus comme données d'entrées pour le phénomène d'advection - BIOCHLOR................................31

Tableau 5 : Domaines de variation retenus comme données d'entrée pour le phénomène de dispersion - BIOCHLOR 32

Tableau 6 : Valeurs et domaines de variation retenus comme données d'entrées pour le phénomène d'adsorption - BIOCHLOR 33

Tableau 7 : Domaines de variation retenus comme données d'entrées pour le phénomène de biodégradation - BIOCHLOR..34

Tableau 8 : Informations générales - BIOCHLOR 34

Tableau 9 : Valeurs retenues comme données d'entrées pour la source de pollution - BIOCHLOR...36

Tableau 10 : Points d'observation - BIOCHLOR 37

Tableau 11 : Bilan massique à 1801 j – BIOCHLOR 1..38

Tableau 12 : Bilan massique à 3521 j – BIOCHLOR 2..40

Tableau 13 : Bilan massique à 3521 j – BIOCHLOR 3..43

Tableau 14 : Synthèse des paramètres de calage - BIOCHLOR 45

Tableau 15 : Concentrations calculées - NAS...50

Tableau 16 : Synthèse des paramètres de calage - NAS......................................50

Tableau 19 : Synthèse des principales remarques concernant l'utilisation de BIOCHLOR et NAS dans le cadre du CR3..52

Tableau 17 : Codes et versions utilisés au cours de la phase 2 d'intercomparaison du CR3...53

Tableau 18 : Comparaison des paramètres de calage retenus.............................54

Tableau 20 : Informations à considérer pour le choix d'un outil de modélisation adapté 60

RESUME

Ce document s'inscrit dans le cadre des travaux menés par l'INERIS sur les sites potentiellement pollués et plus particulièrement sur le transfert des polluants dans les sols et les eaux souterraines (notamment via le programme TRANSPOL).

Il a pour but d'apporter une aide au modélisateur confronté au choix d'un outil adapté et proportionné à l'étude engagée.

Dans une première partie, certains aspects généraux liés à ce type de modélisation sont présentés, en particulier la démarche générale et quelques définitions. Dans une seconde partie, une liste d'outils de calcul disponibles actuellement est donnée, elle met en exergue leur diversité et la difficulté de choisir l'outil le plus adapté.

Une application conduite sur deux d'entres eux, BIOCHLOR et NAS, ainsi que la comparaison des résultats à ceux acquis dans le cadre de la simulation d'un cas traité précédemment par des outils numériques (Cas Réel n°3), apporte des indications complémentaires quant aux éléments justifiant ou non le choix d'un modèle.

Enfin, des recommandations sont formulées ; elles portent principalement sur le choix des phénomènes à considérer, les objectifs attendus et les outils de calcul en eux-mêmes.

Toutefois, notons que la clef de l'efficacité et de la précision lors de la modélisation d'un système aquifère dépend en premier lieu de l'élaboration du modèle conceptuel et de la qualité des données disponibles et utilisées.

Il est également nécessaire de mettre l'accent sur le fait que les modèles peuvent se révéler utiles dans certains cas en tant qu'outil d'aide à la décision, mais qu'ils ne sont pas toujours indispensables pour mettre en œuvre des actions sur un site pollué (notamment des mesures de gestion). La réalisation d'une modélisation peut être longue, voire futile, au vu des données disponibles (peu d'informations ou données déjà suffisamment alarmantes) et elle ne doit en aucun cas retarder une prise de décision quant à la sécurité des personnes potentiellement exposées. En outre, l'ensemble des intervenants et en particulier le modélisateur doit avoir conscience du fait que le modèle ne peut fournir des résultats absolus ni être utilisé sans un minimum de données d'entrée de bonne qualité.

NOMENCLATURE

AEP : Alimentation en Eau Potable

BTEX : Benzène, Toluène, Ethyl-benzène et Xylènes

COHV : Composés Organo-Halogénés Volatils

DF : Différences Finies

f_{oc} : fraction en matière organique du sol

λ : constante de dégradation

PCE : Perchloroéthylène

TCE : Trichloroéthylène

DCE : Dichloroéthylène

CV : Chlorure de Vinyle

ETH : Ethène

EGID : Environnement, Géo-ingénierie et Développement

LPNA : Liquide en Phase Non Aqueuse (ou DNAPL en anglais).

MEDAD : Ministère de l'Écologie, du Développement et de l'Aménagement Durables

TVD : Total Variation Diminishing

EPA : Environmental Protection Agency

ENSMP : École Nationale Supérieure des Mines de Paris

USGS : United States Geological Survey

ZS : Zone Saturée

ZNS : Zone Non Saturée

CONTEXTE ET OBJECTIFS

Dans le cadre des travaux menés sur les sites potentiellement pollués et plus particulièrement sur le transfert des polluants dans les sols et les eaux souterraines, le recours à une modélisation peut s'avérer indispensable à la gestion d'un site. Or, se pose nécessairement la question du choix de l'outil adapté, notamment entre modèle analytique et numérique (cf. définitions au paragraphe 1.1). En effet, selon le site étudié, ce choix se révèle important pour l'obtention de résultats exploitables qui permettront une gestion raisonnée et proportionnée.

Jusqu'à présent, le programme d'appui technique TRANSPOL, mené par l'INERIS pour le compte du MEDAD, a plus particulièrement concerné les modèles numériques, notamment au travers d'exercices d'intercomparaisons. Les équipes modélisatrices prenant part aux exercices avaient un retour d'expérience, des démarches et des outils de calcul (numériques) différents. Ces exercices réalisés avec des contraintes limitatives en termes de données, de temps et de budget inhérentes aux études d'évaluation de risques pour la ressource en eau ont montré l'importance du schéma conceptuel, des données d'entrée, etc (cf. lien http://transpol.ineris.fr/ pour plus de détails).

Le choix d'un outil adapté est également apparu essentiel aux équipes participantes. Ainsi, le principal objet du présent rapport est d'aider le lecteur dans le choix entre les différents outils de calcul disponibles aujourd'hui. L'accent sera particulièrement mis sur le choix à faire entre modèle analytique et numérique.

Dans un premier temps, des rappels seront proposés : définitions, phénomènes à considérer, objectifs d'un modèle et démarche à mettre en œuvre. Dans un second temps, une liste et des informations relatives aux outils disponibles seront fournies (liste non exhaustive car ce rapport n'a ni la vocation ni l'ambition de recenser tous les outils existants).

Enfin, sur un échantillon d'outils (BIOCHLOR et NAS), des tests et comparaisons seront conduits afin de présenter, au vu de ce qui précède et de l'état de l'art actuel, des recommandations pratiques quant au choix entre modèles analytiques et numériques.

Rappelons que les modèles peuvent se révéler utiles dans certains cas en tant qu'outil d'aide à la décision, mais qu'ils ne sont pas toujours indispensables pour mettre en œuvre des actions sur un site pollué (notamment des mesures de gestion). En effet, la réalisation d'une modélisation peut être longue voire futile au vu des données disponibles (peu d'informations ou données déjà suffisamment alarmantes) et elle ne doit pas retarder une prise de décision quant à la sécurité des personnes et des biens. En outre, l'ensemble des intervenants doit avoir conscience du fait que le modèle ne peut fournir des résultats absolus ni être utilisé sans un minimum de données d'entrée de bonne qualité.

1. RAPPELS LIES A LA MODELISATION DES TRANSFERTS AU SEIN DU MILIEU POREUX

Les paragraphes qui suivent abordent des points de généralités liés au choix de l'outil adapté dans le cadre d'une modélisation de la migration des polluants dans les sols et les eaux souterraines (d'après Castany, 1982 ; De Marsily, 1994 et 1981 ; Rollin et Quiot, 2006).

1.1 DEFINITIONS

Modèle

Simplification de la réalité dont le but est de comprendre l'évolution d'un système réel pour pouvoir en prédire l'évolution.

La plupart des modèles hydrogéologiques utilisés de nos jours sont des modèles mathématiques déterministes. Ils sont basés sur les principes de la conservation de la masse et leur mise en œuvre nécessite généralement la résolution d'équations différentielles partielles.

Des solutions exactes peuvent être obtenues analytiquement (modèle analytique) alors que les méthodes numériques fournissent des solutions approchées à travers la discrétisation du système dans l'espace et le temps (modèle numérique).

Modèle analytique

Outil simplifié par rapport aux modèles numériques, utilise une solution mathématique des équations d'écoulement et/ou de transport en tous points de l'espace et du temps. Ainsi, le domaine étudié n'est pas discrétisé par un maillage. L'écoulement est généralement unidirectionnel et permanent, le milieu est considéré comme homogène et isotrope.

Au cours d'une simulation, dans un outil tel que BIOCHLOR (cf. paragraphe 3.2), le suivi des résultats (concentrations calculées) n'est possible qu'à un temps prédéfini et le long de l'axe du panache comme le schématise la Figure 1.

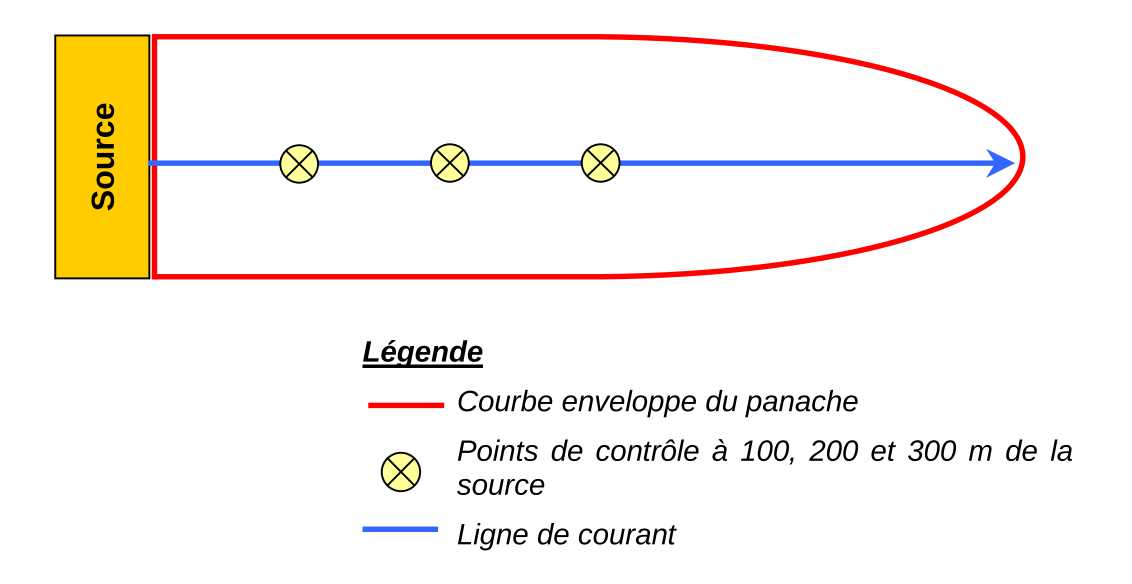


Figure 1 : Schématisation d'une simulation réalisée par un modèle analytique (exemple BIOCHLOR)

Modèle numérique

Utilise une solution mathématique des équations d'écoulement et/ou de transport. Le domaine étudié est discrétisé dans l'espace et dans le temps et un schéma numérique est utilisé (Différences Finies, Eléments Finis, Volumes Finis, etc).

Ces outils permettent de simuler des conditions hydrogéologiques hétérogènes, des gradients verticaux de charge ou de concentration ainsi que des phénomènes transitoires (pompages, variation d'émission de source de pollution dans l'espace et dans le temps).

La Figure 2 montre un exemple de maillage régulier, le système est ici discrétisé en cellules de 5 m de côté.

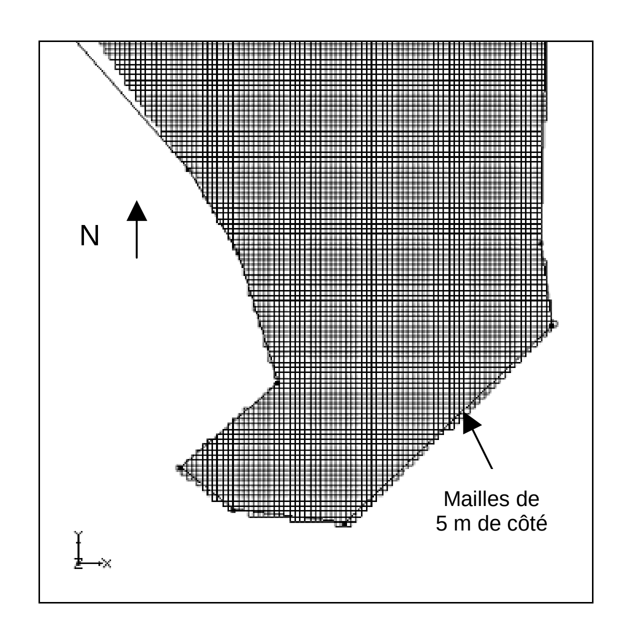


Figure 2 : Exemple de maillage pour un modèle numérique aux DF (réalisé sous MODFLOW 2000 - USGS)

Ce type de modèle peut être employé pour simuler le transport de traceurs non réactifs. Le modèle peut également être utilisé pour simuler le transport réactif de substances organiques et inorganiques, soit en utilisant un modèle K_d, soit en le couplant à un modèle géochimique de spéciation (à ce sujet voir les réserves quant à l'usage de ces modèles dans le guide TRANSPOL « Recommandations pour la modélisation des transferts des éléments traces métalliques dans les sols et les eaux souterraines », Rollin et Quiot, 2006 ; ainsi que dans l'article « Importance de la spéciation géochimique pour l'atténuation des pollutions métalliques » Claret *et al.*, 2007).

Différences Finies (DF)

Cette méthode de résolution est basée sur la recherche, au centre de chacune des mailles, d'une valeur numérique de la charge hydraulique, supposée représenter une valeur moyenne de la véritable charge. Les mailles considérées peuvent être des carrés, des rectangles ou des parallélépipèdes rectangulaires (en 3D).

Cette méthode, facile à comprendre et à programmer, convient très bien aux problèmes régionaux d'écoulement de nappes, mais elle est plus limitée en ce qui concerne la résolution de l'équation de transport et le calcul des concentrations (d'autres méthodes existent comme le TVD, Total Variation Diminishing).

La Figure 3 présente le schéma de résolution aux différences finies, tel qu'il est notamment employé par le logiciel MARTHE (BRGM), pour résoudre l'équation de diffusivité[1]. Le calcul des charges se fait en établissant l'équation d'équilibre des débits entre la maille de calcul (C) et ses six voisines (haut, bas, sud, nord, est, ouest).

[1] Cette équation définit entièrement l'écoulement en permettant la détermination du champ de charge hydraulique.

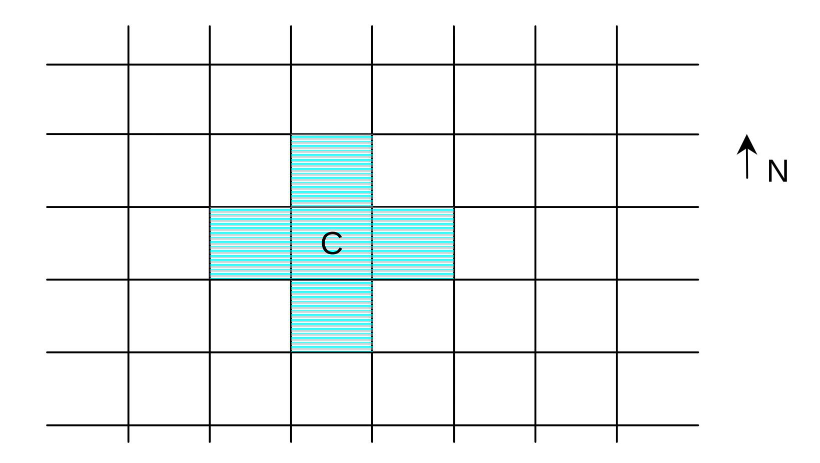


Figure 3 : Schéma de résolution aux différences finies (exemples : MODFLOW, MARTHE)

Eléments Finis (EF)

Plus délicate à comprendre et à programmer cette approche est néanmoins plus flexible que celle des DF. La forme des mailles est moins limitée (triangle et quadrilatère en 2D, tétraèdre et parallélépipède en 3D). Cependant, la multiplication des données d'entrée induit un temps de calcul plus important et selon la connaissance du site, une incertitude accrue vis à vis des résultats.

Pour les écoulements, cette méthode est généralement employée dans le cas de problèmes locaux de génie civil tels que le calcul du débit d'exhaure d'un fond de fouille ou la simulation des écoulements autour d'un barrage, elle s'applique aussi lorsque l'on observe des discontinuités géologiques telles que des fractures ou fissures.

Pour le transport, les EF sont bien adaptés puisqu'ils permettent de stabiliser la dispersion numérique plus efficacement qu'avec les DF.

Les principales différences entre ces deux méthodes sont donc le temps de calcul et l'échelle des phénomènes naturels à simuler. Dans le cas des DF le maillage est structuré, il est non structuré pour les EF.

D'autres méthodes existent et le lecteur pourra se reporter au paragraphe 3 du guide modélisation MACAOH (ADEME, 2006) pour avoir des informations complémentaires quant aux aspects plus théoriques et aux développements en cours pour ce qui concerne les schémas de résolution.

Modèle développé sous Excel (Spreadsheet)

Comme le montrent les Figure 4 et Figure 5, c'est un modèle analytique voire semi-analytique qui se présente sous la forme de tableaux de calculs (type feuilles Excel, c'est notamment le cas du modèle BIOCHLOR ou CORONA SCREEN).

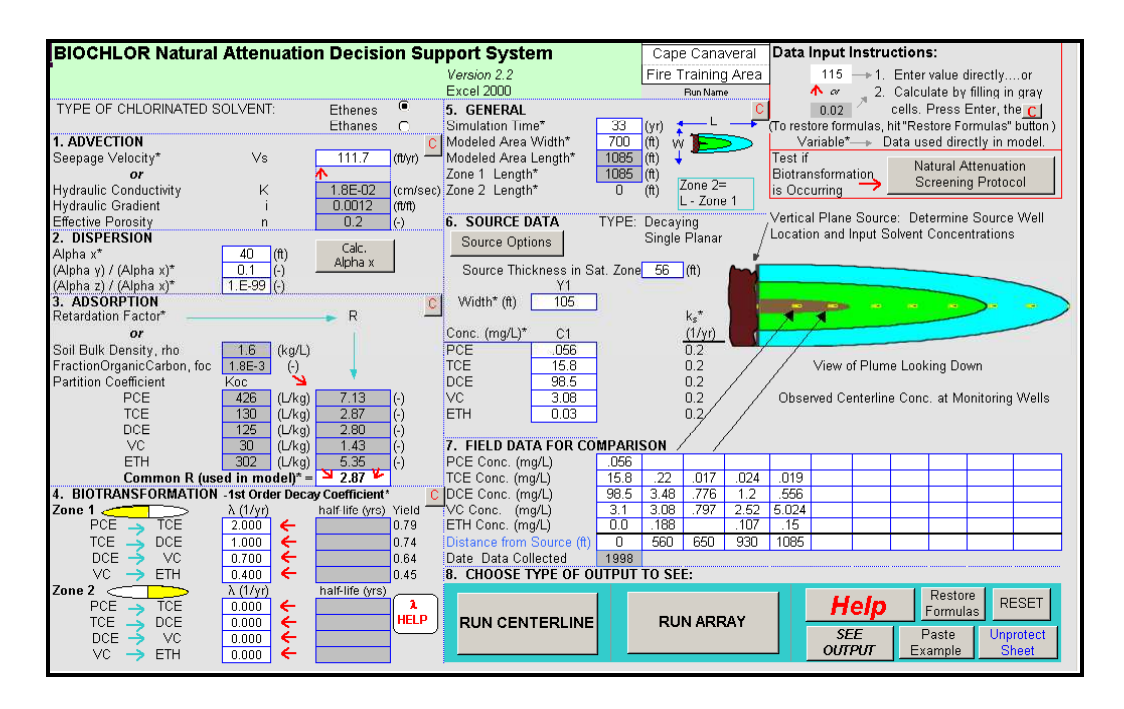


Figure 4 : Premier exemple de modèle sous Excel (capture d'écran BIOCHLOR 2.2 – US EPA, 2002)

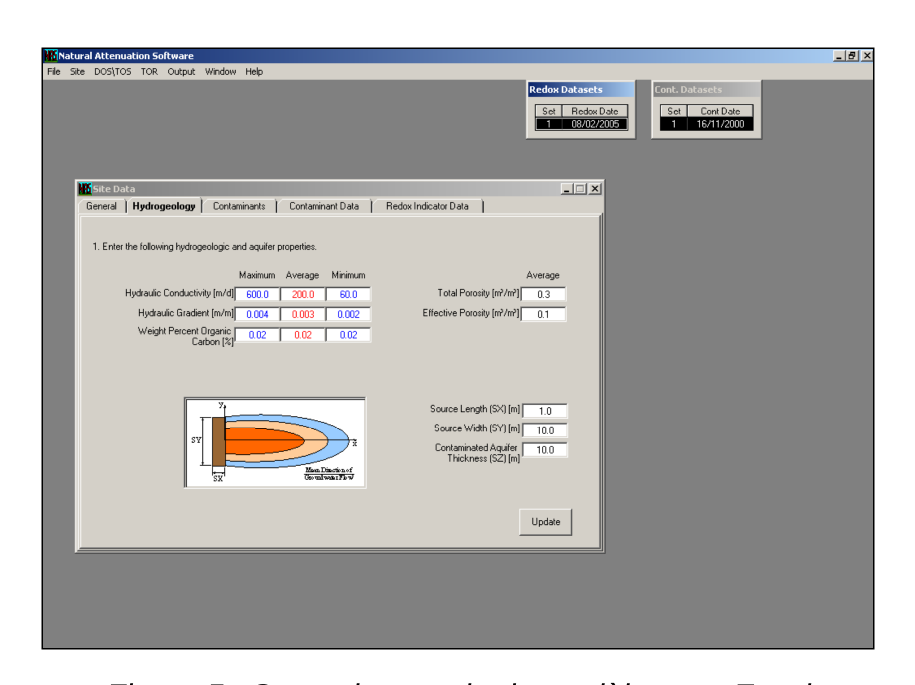


Figure 5 : Second exemple de modèle sous Excel (capture d'écran NAS 2.2.0 – VirginiaTec, US EPA, US Navy, 2006)

1.2 PHENOMENES ASSOCIES AU TRANSPORT DE POLLUANTS AU SEIN DU MILIEU POREUX

Le tableau suivant rappelle les principaux mécanismes et paramètres associés à la propagation des polluants dans les aquifères. En effet, les outils disponibles aujourd'hui ne permettent pas tous de simuler l'ensemble des ces mécanismes, c'est notamment le cas de la volatilisation pour laquelle très peu d'outils sont adaptés (cf. paragraphe 2).

Ainsi, le choix d'un outil peut être guidé par la prise en compte ou non d'un mécanisme intervenant potentiellement dans le transfert du ou des polluants considérés (cf. paragraphe 4).

Tableau 1 : Principaux mécanismes de transport physico-chimiques et paramètres associés à la propagation des polluants dans les aquifères (notamment d'après Lemière & al. 2001 ; Wiedemeier & al. 1998)

Mécanismes	**Principaux paramètres associés**
Advection (ou convection)	coefficient de perméabilité K porosité efficace n_e
Dispersion cinématique	coefficient de dispersivité longitudinale α_L coefficient de dispersivité transversale α_T
Diffusion moléculaire	coefficient de diffusion moléculaire D
Adsorption (ou sorption)	coefficient de partage sol-eau K_d (hypothèse K_d)
Biodégradation	constante de dégradation λ ou temps de demi-vie $T_{1/2}$ (hypothèse cinétique de biodégradation ordre 0 et 1)
Volatilisation	constante de Henry pression de vapeur saturante

Le lecteur pourra se reporter notamment au paragraphe 2 du guide modélisation MACAOH (ADEME, 2006) pour avoir des informations complémentaires quant aux aspects plus théoriques et à la prise en compte de ces mécanismes dans les équations d'écoulement et de transport.

1.3 OBJECTIFS DE LA MODELISATION

Le recours à la modélisation peut avoir différents objectifs dont les principaux sont :

- synthétiser les données disponibles pour identifier les nouvelles zones à investiguer ou à surveiller plus particulièrement (développement du réseau de surveillance, etc) ;
- prédire l'évolution d'une pollution (temps d'arrivée du panache - concentration donnée - au droit d'une zone sensible) ;
- tester la mise en œuvre d'un procédé de réhabilitation sur les écoulements et/ou le panache (atteinte des seuils définis suite à la mise en place d'une barrière hydraulique, d'un pompage, etc) ;
- tester l'impact de l'atténuation naturelle sur l'étendue du panache de pollution (temps nécessaire à la régression du panache, etc).

Ces objectifs peuvent se compléter sur le même projet. En effet, il arrive fréquemment qu'une modélisation montre l'évolution de la pollution et *in fine* serve à améliorer le réseau de surveillance.

Nous verrons au paragraphe 4 comment les différents objectifs peuvent induire d'eux-mêmes un choix d'outil adapté au cas traité. En effet, comme le montre le paragraphe suivant, la première étape de conception et d'application d'un modèle passe par la définition de la nature du problème et de l'objectif du modèle.

1.4 PRINCIPALES ETAPES A CONSIDERER LORS DE LA REALISATION D'UNE MODELISATION

Le paragraphe qui suit positionne la question du choix de l'outil dans la démarche globale de modélisation. A cet effet, la Figure 6 présente les principales étapes de cette démarche sous forme schématique.

Précisons toutefois que certaines étapes peuvent ne pas exister pour un outil analytique, c'est en particulier le cas du calage de la piézométrie en transitoire (fonction capacitive du réservoir) qui ne peut pas être réalisé avec ce type d'outils.

Première étape

Analyse des données disponibles ou restant à acquérir (citons notamment mais cette liste n'est pas exhaustive : plan de masse, résultats du suivi piézométrique voire limnimétique, des analyses sur les milieux eau, sol, air (en particulier gaz du sol), informations météorologiques, examen de la qualité de ces informations et visite du site).

Définition de la nature du problème et de l'objectif du modèle.

Elaboration d'un premier schéma conceptuel.

Notons que certains phénomènes (cf. paragraphe précédent) pourront être considérés comme importants à une certaine échelle de temps et d'espace, alors qu'ils seront négligeables à une autre.

Seconde étape

Lorsque la modélisation apparaît nécessaire, il convient de choisir un outil adapté. C'est l'objet de ce guide, des recommandations seront formulées à cet effet à la fin de ce document.

Troisième étape

Construction du modèle puis calage des charges (piézométrie) en régime permanent (ou pseudo-permanent) puis en régime transitoire si nécessaire et si possible au vu des données d'entrée disponibles ; en utilisant les paramètres de calage associés (paramètres hydrodynamiques tels que la perméabilité en permanent, l'emmagasinement en transitoire ou une condition aux limites méconnue par exemple un pompage).

Calage des concentrations en régime permanent (source infinie) ou en transitoire (source finie - tarissement - ou apparition de nouvelles pollutions au cours de la simulation), en utilisant les paramètres de calage associés (paramètres hydrodispersifs tels que la dispersivité ou liés à la source comme le taux d'entrée de polluants dans le système).

Le calage peut être conduit manuellement (procédure itérative, « trial and error ») ou être semi-automatique voire totalement automatique (problème inverse, voir notamment le logiciel PEST à ce sujet). Néanmoins, même dans le cas d'une procédure automatisée, le jugement et l'expérience du modélisateur restent prépondérants.

Les erreurs de calage sont généralement liées à un problème de conceptualisation et/ou d'incertitude concernant les données d'entrée.

Quatrième étape

Test de sensibilité : l'analyse de la sensibilité du modèle par rapport à un paramètre doit être effectuée afin d'appréhender le poids de l'incertitude liée à celui-ci sur les résultats obtenus. Ces tests sont menés en majorant et minorant fortement la valeur du paramètre en question. A titre d'exemple, la variation appliquée à ces paramètres peut être de +/- 50 % par rapport à la valeur de calage (donne une valeur max. et min.).

Cinquième étape

Validation des résultats en terme de piézométrie et de concentration (d'une simulation prédictive) par comparaison à des mesures réalisées sur site après quelques mois (dans le cadre d'un suivi).

Remarques :

- les difficultés rencontrées au cours du calage peuvent conduire à l'acquisition de nouvelles données ou à devoir compléter la recherche bibliographique en cours de modélisation ;
- le calage des concentrations peut nécessité l'amélioration du calage des charges, en particulier s'il a été réalisé en régime permanent pour lequel la fonction capacitive du réservoir n'intervient pas ;
- dans le cas où elles seraient mal connues, le calage peut également nécessiter la modification des conditions aux limites voire des limites du système (géométrie, taille des mailles, etc) ;
- il convient de vérifier que les résultats produits sont générés sans erreurs numériques excessives (au travers de la convergence[2], des bilans hydriques et massiques).

---

[2] Définition d'un critère de convergence adapté.

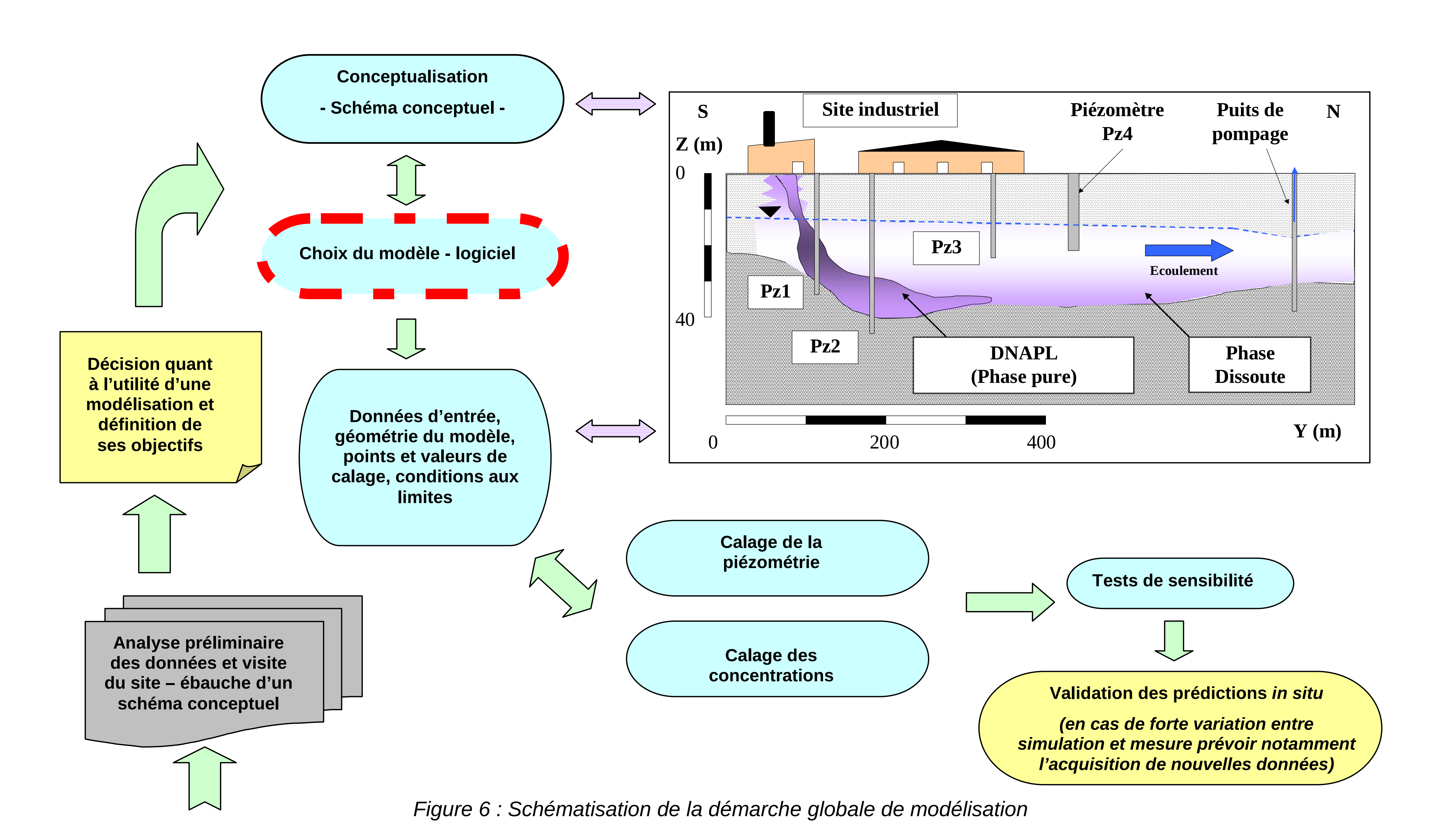


Figure 6 : Schématisation de la démarche globale de modélisation

2. OUTILS EXISTANTS

Il existe actuellement un très grand nombre de modèles développés pour simuler les écoulements et/ou le transport de polluants dans les sols et les eaux souterraines (en Zone Saturée (ZS) et en Zone Non Saturée (ZNS)).

Une recherche bibliographique a permis de dresser une liste non exhaustive présentée ci-dessous, valable en fin d'année 2007.

De plus amples informations quant aux caractéristiques (phénomènes considérés, références…) des principaux outils listés ci-après sont fournies en **Annexe A**. Pour la plupart, les sources d'informations consultées ont été les pages web dédiées, les manuels d'utilisation et les publications. Le test de l'ensemble de ces outils n'était pas justifié.

L'**Annexe B** fournit également des exemples de travaux d'application pour une partie des outils cités.

Tableau 2 : Liste non exhaustive d'outils de modélisation disponibles fin décembre 2007

ANALGWST-PATCHF	FEMWATER	NAS
ART3D	GFLOW	PHAST
AT123D	HELP	PHREEQC
BIOTREND	HYDROCHEM	PHT3D
BIO 1D	HYDRUS 1D	POLLUTE
BIOBALANCE	HYDRUS 2D/3D	RBCA
BIOCHLOR	HYTEC	RT3D
BIOMOC	MARTHE	SEAM3D
BIOPLUME III	MASS FLUX TOOLKIT	SESOIL
BIOREDOX	MIKE SHE	SIMUSCOPP
BIOSCREEN	MISP	TRANSIN
BIOSLURP	MOC3D	TOUGH2
CHAIN 2D	MODFLOW-SURFACT	UTCHEM
CHESS	MODPATH	VISUAL RFLOW
CHEMFLOW	MOFAT	VLEACH
CORONA SCREEN	MT3DMS	WINFLOW
FEFLOW	NAPL	

Cette liste ainsi que l'**Annexe A** mettent en exergue la grande variété des outils disponibles (une cinquantaine sont cités ici), du modèle analytique au modèle numérique de plus en plus complexe en passant par des outils semi-analytiques (tel que VISUAL RFLOW par exemple).

Au vu des résultats de cette recherche, il apparaît également que de nombreuses différences existent, notamment quant à la discrétisation spatiale du système (modèle analytique ou numérique), au nombre de dimensions considérées, aux phénomènes simulés (sorption, biodégradation, volatilisation), à la prise en compte de la ZNS…

Les polluants pris en compte peuvent également être spécifiques à une famille de polluants, ce qui est le cas pour deux outils développés par l'US-EPA : BIOSCREEN (BTEX) et BIOCHLOR (COHV).

La provenance des modèles est également variée, certains sont issus de recherches engagées par des laboratoires universitaires (VISUAL RFLOW en cours de développement à l'EGID) ou de partenariats université/société privée (TRANSIN utilisé par ENVIROS dans le cadre du CR3, cf. Tableau 18).

Certains outils sont un couplage entre des codes plus spécialisés et jouissant d'un retour d'expérience important et positif de la part des développeurs et des utilisateurs dans leur domaine de prédilection. C'est le cas de PHT3D (version 1.0) qui intègre MT3DMS (version 4.0) et PHREEQC-2 (version 2.5), tous deux reconnus respectivement pour la simulation de l'écoulement et du transport réactif au sein d'un aquifère.

Il apparaît que de nombreux modèles cités précédemment ont été développés afin d'évaluer ou de vérifier la mise en place de phénomènes liés à l'atténuation naturelle des polluants, c'est le cas de BIOREDOX, BIOPLUME III et BIOSLURP (Mulligan et Yong, 2004).

Des outils beaucoup plus complexes existent, en particulier ceux qui traitent de pollutions multiphasiques ; mais dans ce cas, de nombreux paramètres sont nécessaires (et pas toujours connus), ce qui conduit à de fortes incertitudes quant aux résultats obtenus. Citons notamment le modèle numérique 3D, TOUGH2 (version 2.2) ainsi que UTCHEM (version 9.2) pour la simulation du transfert de pollutions triphasiques (eau, gaz et phase organique).

Une étude présentant un grand nombre de codes a notamment été consultée (de l'ordre de 250). Elle a été menée outre Atlantique de 2002 à 2005 (en trois phases) afin de recenser les outils existants puis d'en tester un échantillon traitant des pollutions de type hydrocarbures (TOUGH2 et FEMWATER) (Pauls *et al.*, 2002, 2003 ; MDH, 2005). Les comparaisons menées entre TOUGH2 (version 2 avec le module T2VOC) et FEMWATER, à partir de scénarios génériques, ont conduit les auteurs à recommander l'outil multiphasique (TOUGH2). En effet, la possibilité de prendre en compte les différentes phases (pure, dissoute et volatile) présente, dans les cas traités, un aspect conservatoire car la source et son atténuation naturelle semblent plus justement simulées. Par ailleurs, le principal inconvénient de TOUGH2 semble être son interface (et le traitement graphique des résultats).

Ci-dessous sont reportées, à titre indicatif, certaines bases de données identifiées au cours de cette recherche (liste de logiciels disponibles, description…) :

http://typhoon.mines.edu/

http://water.usgs.gov/nrp/gwsoftware/moc.html (outils USGS)

http://www.epa.gov/ada/csmos/models.html (outils EPA)

http://www.ehsfreeware.com/gwqclean.htm (liens vers téléchargements gratuits)

Les pages web développées par les vendeurs de logiciels permettent également de se renseigner sur les capacités des outils de calcul, citons notamment (liste non exhaustive) :

http://www.ems-i.com/

http://www.swstechnology.com/

http://www.scientificsoftwaregroup.com/

Enfin, un document rédigé par l'US-EPA (au sein de la représentation de l'état de l'Ohio) donne des informations complémentaires concernant la modélisation des écoulements et du transport de polluants. En particulier, les différences entre modèles 1D, 2D et 3D sont présentées (EPA, 2007).

3. INTERCOMPARAISON

Afin de tester les différences pouvant être attendues entre les concentrations calculées entre outils analytiques et numériques, un essai d'intercomparaison spécifique a été engagé.

Il a porté sur la mise en œuvre d'une nouvelle phase d'intercomparaison dédiée au cas réel n°3 du programme TRANSPOL (CR3). Ce cas réel de pollution est le plus récent étudié, il traite d'une nappe alluviale polluée par des solvants chlorés.

Le choix des outils analytiques testés ici a principalement été basé sur le retour d'expérience interne à l'INERIS. Il apparaît que le logiciel BIOCHLOR est souvent utilisé dans ce type d'études ce qui a conduit à le retenir. Le logiciel NAS, moins connu, mais présentant un intérêt particulier compte tenu de la possibilité de considérer les conditions redox du milieu a également été utilisé.

La démarche employée au cours de cet exercice est présentée comme suit :

- description de l'outil et mise en œuvre de simulations ;
- présentation des résultats et des avantages/inconvénients du modèle ;
- comparaison aux résultats de la phase 2 d'intercomparaison du CR3 (modèles numériques) et conclusions de cet essai.

3.1 RAPPELS QUANT AU CR3 ET AUX TRAVAUX REALISES

Une première intercomparaison de quatre modélisations a été réalisée en 2005 (Quiot, 2005) sur le Cas Réel n°3, cas d'une nappe alluviale située en Espagne et polluée par des solvants chlorés (perchloroéthylène notamment). Cette première phase relative à la création du modèle numérique et aux premières simulations hydrodynamiques puis hydrodispersives a été menée par les bureaux d'études ANTEA et ENVIROS, l'Ecole des Mines de Paris et l'INERIS.

La démarche retenue a consisté à organiser une première réunion de concertation et d'échanges (présentation du site, données disponibles, phénomènes à considérer, choix des hypothèses de départ et des données d'entrée…), de la même manière que pour une évaluation des risques "classique". A la suite de cette réunion un cahier des charges a été rédigé (CdC n°2 ; Rollin, 2003) et transmis aux participants afin de contraindre en partie l'exercice (géométrie du modèle, conditions aux limites, données de calage (charges et concentrations), quelques valeurs et domaines de variation étaient fournies (résultats d'investigations ou d'une première recherche bibliographique)).

Au cours de cette première phase, le calage des concentrations devait être réalisé à 1800 j de simulation (soit le 15 novembre 2000[3]).

---

[3] La date de la campagne de mesure employée pour le calage des concentrations est le 16 novembre 2000 ce qui correspond à 1801 j de simulation par rapport à la date initiale considérée.

Les résultats obtenus ont mis en évidence la nécessité d'acquérir des données supplémentaires sur les paramètres permettant de simuler les phénomènes de sorption (coefficient de partage sol-eau, K_d) et de biodégradation (temps de demi-vie, $T_{1/2}$). L'INERIS a donc mis en œuvre de nouvelles investigations dont la réalisation a été confiée à ENVIROS au cours du second semestre 2005 (sur site et en laboratoire).

Les nouvelles données d'entrée acquises ont été présentées dans un nouveau cahier des charges (CdC n°3 ; Rollin et Quiot, 2006) puis une seconde phase d'intercomparaison a été lancée avec les bureaux d'études ANTEA et ENVIROS, l'INERIS et l'EGID.

Cette seconde phase visait principalement à réduire les incertitudes portant sur la simulation de la biodégradation et de la sorption (phénomènes liés à l'atténuation naturelle) et à évaluer l'apport de la quantification des paramètres $T_{1/2}$ et K_d pour le PCE sur les résultats du calage des concentrations en PCE, TCE et DCE.

Suite à la réalisation des quatre modélisations et au rendu des résultats conformément au cahier des charges, une réunion de concertation a été organisée en novembre 2006 avec l'ensemble des participants et des personnes impliquées dans le domaine de la modélisation des écoulements souterrains et du transport de polluants (bureaux d'études, laboratoires universitaires et centres de recherche). A la suite de cette réunion, une synthèse des résultats concernant cette seconde phase d'intercomparaison a été rédigée (Quiot, 2006).

L'ensemble de ces documents est consultable sur le site dédié au programme :

http://transpol.ineris.fr/

La figure et le tableau qui suivent présentent respectivement le site étudié et les principales données d'entrée proposées dans le cahier des charges (d'après mesures et recherche bibliographique).

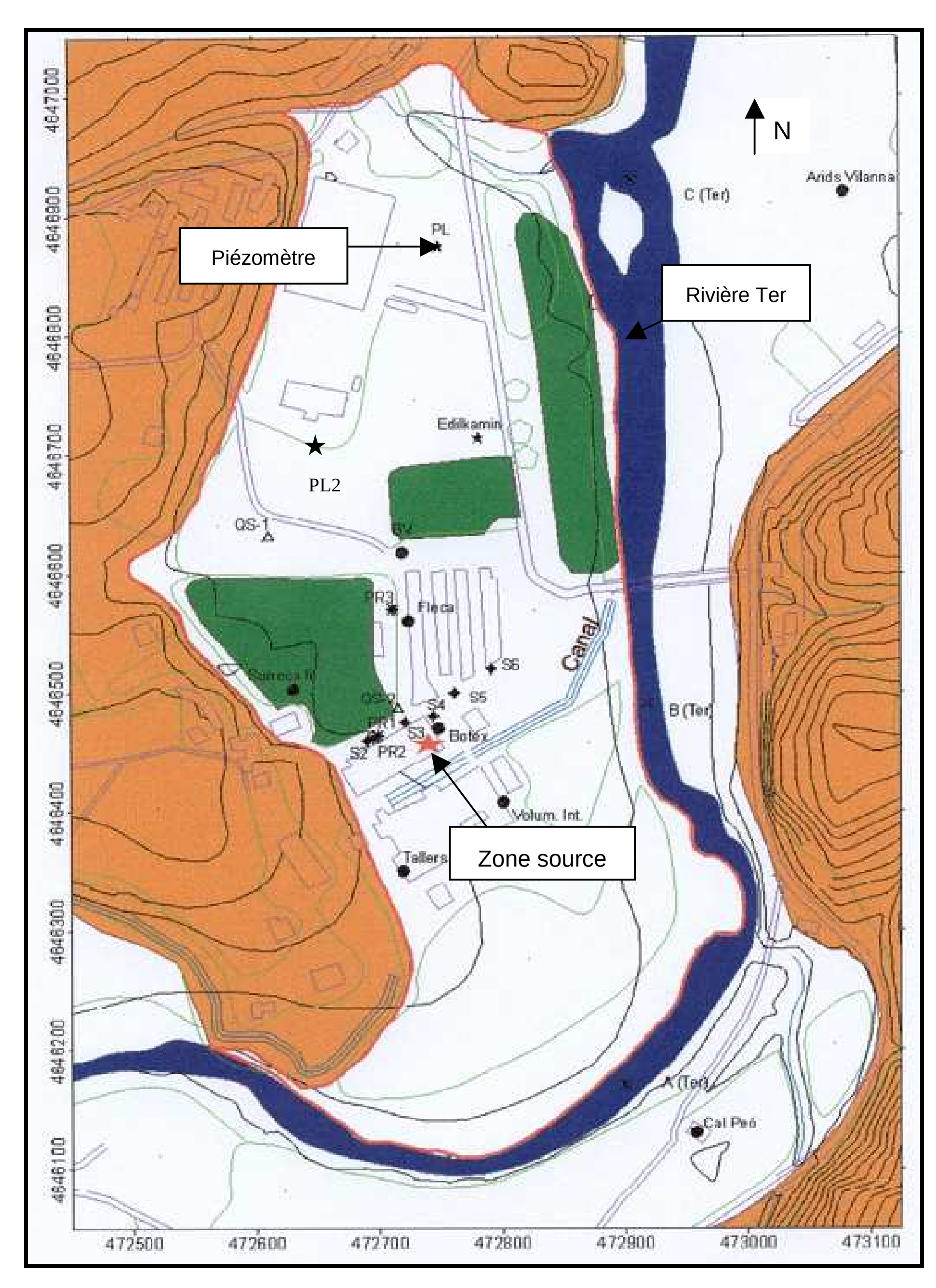


Figure 7 : Carte du site (coordonnées UTM) (Rollin et Bour, 2002)

Tableau 3 : Principales données d'entrée (Rollin, 2003)

Données d'entrée		**Valeurs**
Source de pollution	Localisation	Coordonnées du centre de la pollution et rayon à considérer
	Concentration	Constante durant les 5 premières années et décroissance linéaire durant les 5 années suivantes
Hydrogéologie	Coefficient de perméabilité	60 à 600 m/j
Adsorption	f_{oc}	0,0002 à 0,001
Biodégradation	λ PCE	0,07 à 1,2 an^{-1}
	λ TCE	0,05 à 0,9 an^{-1}
	λ cis 1,2-DCE	0,18 à 3,3 an^{-1}
	λ CV	0,12 à 2,6 an^{-1}

3.2 BIOCHLOR

3.2.1 REMARQUE PRELIMINAIRE CONCERNANT BIOCHLOR (ET BIOSCREEN)

Suite aux remarques émises depuis quelques années par différents auteurs au sujet de la solution analytique de Domenico (Domenico, 1985 et 1987), utilisée notamment par l'US-EPA dans BIOCHLOR et BIOSCREEN, des précisions ont été apportés par les développeurs quant aux limitations à attendre sur ces outils et comment en limiter les effets, cf. http://epa.gov/ada/csmos/domenico.html. Les principaux éléments présentés sont résumés ci-après.

En effet, de potentielles limites quant à l'utilisation de la solution de Domenico dans le cadre de la simulation du transfert d'une pollution au sein du milieu poreux ont été mises en avant dans de récentes publications : Guyonnet et Neville, 2004 ; Srinivasan *et al.*, 2007 ; West *et al.*, 2007.

Or, BIOSCREEN utilise la solution originale de Domenico (1987) tandis que BIOCHLOR emploie une version modifiée (Martin-Hayden et Robbins, 1997). Les développeurs reconnaissent que cette solution (même modifiée) n'est qu'une approximation et qu'elle peut, sous certaines conditions, entraîner des erreurs. Il apparaît que cette erreur est majorée en cas de valeurs élevées de la dispersivité longitudinale (Srinivasan *et al.*, 2007; West *et al.*, 2007). Néanmoins, ils notent que l'erreur est négligeable pour des valeurs de dispersivité longitudinale raisonnablement basses.

Considérant le fait que ce paramètre n'est pas mesuré (par traçage) mais est un paramètre de calage à ce stade d'une étude, ils soutiennent que la solution de Domenico est suffisante dans le cadre du recours à un modèle analytique tel que BIOCHLOR ou BIOSCREEN.

Au final, afin de limiter le risque d'erreur, il est recommandé d'employer un faible coefficient de dipersivité longitudinale et de conserver également un nombre de Peclet[4] supérieur ou égal à 10 (pour lequel l'advection est prépondérante vis à vis de la dispersion).

Au cours de l'exercice décrit par la suite, la dispersivité longitudinale retenue est de l'ordre de 10 m et le nombre de Peclet est supérieur à 10 pour les points d'observation retenus. Ainsi, les simulations réalisées respectent les recommandations décrites précédemment.

3.2.2 PRESENTATION DE BIOCHLOR

BIOCHLOR est un modèle analytique qui permet de simuler l'évolution d'une pollution et notamment l'atténuation naturelle des polluants dissous (chloroéthènes ou chloroéthanes exclusivement[5]). Le logiciel, programmé sous Microsoft Excel (spreadsheet), est basé sur la solution analytique de Domenico (Domenico, 1987) modifiée (Martin-Hayden et Robbins, 1997). Il simule l'advection, la dispersion, la sorption et la biodégradation par déchloration réductrice (condition anaérobie avec dégradation séquentielle du 1er ordre).

Il est employé dans le cadre de simulations portant sur des aquifères poreux, relativement homogènes de lithologie sablo-graveleuse. Il simule exclusivement les phénomènes en ZS.

Cet outil permet de mettre en œuvre trois types de simulations :

- transport de chloroéthènes ou de chloroéthanes dissous sans biodégradation ;
- transport de chloroéthènes ou de chloroéthanes dissous avec biodégradation (homogène) ;
- transport de chloroéthènes ou de chloroéthanes dissous avec biodégradation (hétérogène sur deux zones).

BIOCHLOR dispose également d'un outil (méthode de score) lié à la mise en évidence de l'atténuation naturelle qui permet de tester si la biodégradation (réductrice) est un phénomène envisageable sur le site étudié (basé sur le protocole de l'US-EPA rédigé en 1998). Une application au site de Benfeld (67) est présentée par le BRGM dans un rapport rédigé en 2006 sur l'état des connaissances sur l'atténuation naturelle (pollution au CCl_4, cf. Saada *et al*. 2006).

3.2.3 REALISATION D'UN MODELE BIOCHLOR

Le modèle développé dans le cadre de cet essai d'intercomparaison est présenté ci-après. Le lecteur est également invité à consulter la notice du logiciel pour une meilleure compréhension des possibilités offertes par cet outil (guide d'utilisation version 1.0 à télécharger en même temps que BIOCHLOR, Aziz *et al.*, 2000).

---

[4] Pour calculer le nombre de Peclet (sans dimension), la méthode préconisée par les développeurs consiste à calculer le produit entre la vitesse moyenne (m/s) et la distance (m) au point de référence puis de le diviser par le coefficient de dispersion (m^2/s). Notons que lorsqu'un maillage est utilisé, le nombre de Peclet peut également être calculé en divisant la taille caractéristique du maillage (m) par la dispersivité longitudinale (m).

[5] Familles des Composés Organo-Halogénés Volatils (COHV).

La réalisation d'un modèle avec l'outil BIOCHLOR, comme pour l'ensemble des modèles, débute par le choix des données d'entrée à considérer. Ces valeurs concernent les phénomènes que sont l'advection, la dispersion, l'adsorption, la biodégradation, la taille du domaine étudié, les caractéristiques de la source de pollution.

Dans le cas présent, les valeurs mentionnées précédemment (cf. Tableau 3) ont été utilisées. En l'absence de valeurs issues du cahier des charges rédigé en 2003 (Rollin, 2003), d'autres sources bibliographiques ont été utilisées (notamment rapport de modélisation Quiot, 2004).

Advection

Concernant la simulation de ce phénomène, BIOCHLOR calcule la vitesse effective, cette vitesse se détermine par le coefficient de perméabilité (K), le gradient hydraulique (i) et la porosité effective (n_e) :

$$v_e = \frac{K.i}{n_e}$$

Une valeur de porosité efficace de 10 % a été considérée (d'après la lithologie) et un gradient de 0,001 a été estimé à partir de la piézométrie disponible.

La vitesse effective est un paramètre de calage du fait en particulier de l'incertitude liée au coefficient de perméabilité (cf. Tableau 4).

Tableau 4 : Valeurs et domaines de variation retenus comme données d'entrées pour le phénomène d'advection - BIOCHLOR

Paramètre	Valeur et domaine de variation	Paramètre de calage
K	0,069 à 0,694 cm/s	Oui
i	0,001	Non
n_e	0,1	Non

Dispersion

Le domaine de variation du coefficient de dispersivité longitudinale a été calculé en utilisant deux techniques proposées par le logiciel. En effet, en l'absence de valeur, BIOCHLOR propose d'appliquer deux équations empiriques basées sur la longueur du panache (Lp) afin d'estimer la dispersivité longitudinale (αL) :

$$\alpha_L = 0{,}1 \times Lp$$ Équation 1

$$\alpha_L = 3{,}28 \times 0{,}82 \times \left[Log \times \left(\frac{Lp}{3{,}28} \right) \right]^{2,446}$$ Équation 2

La longueur du panache pouvant être considérée ici est de l'ordre de 3000 à 5000 pieds[6] (914 à 1524 m).

[6] 1 m = 3,2808 pieds

La dispersivité transversale est estimée comme représentant 1/10ème de la dispersivité longitudinale.

La dispersivité verticale n'a pas été définie puisque la source est supposée affectée à toute la ZS comme décrit dans la suite de ce paragraphe.

La dispersivité longitudinale est également un paramètre de calage (cf. Tableau 5).

Tableau 5 : Domaines de variation retenus comme données d'entrée pour le phénomène de dispersion - BIOCHLOR

Paramètre	Domaine de variation	Paramètre de calage
Lp	3000 à 5000 pieds	Oui
αL Équation 1	300 à 500 pieds	Oui (lié à Lp)
αL Équation 2	38,27 à 45,67 pieds	Oui (lié à Lp)

Adsorption

Le phénomène d'adsorption des polluants sur la matière organique induit un retard dans le transfert des polluants. BIOCHLOR calcul ce facteur de retard mais une seule valeur médiane est retenue pour les différents composés étudiés.

Le coefficient de retard, considéré comme constant, est estimé selon la formule suivante :

$$R = 1 + \left[\frac{d \times (1-n)}{n}\right] \times K_d$$

d : densité[7] [g/cm^3]

n : porosité totale [-]

K_d : coefficient de partage sol-eau [cm^3/g]

Dans le cas de pollution souterraine, le coefficient de partage sol-eau (K_d) caractérise, à l'équilibre, le rapport entre la concentration en substance polluante adsorbée au niveau de la matrice du milieu récepteur, et la concentration en substance polluante dissoute dans les eaux souterraines. Il est lié au K_{oc} (coefficient de partage octanol-carbone organique) et au K_{ow} (coefficient de partage entre l'eau et le n-octanol) par différentes formules empiriques.

Le K_d peut notamment être estimé à partir de la relation suivante, en cas d'absence de mesures directes :

$$K_d = K_{oc} \times f_{oc}$$

K_{oc} : coefficient de partage octanol-carbone organique (cm^3/g ou L/kg) ;

f_{oc} : fraction en matière organique du sol.

---

[7] Bulk density.

Cependant, des limitations existent quant à l'application de cette formule (cf. Rollin et Quiot, 2005). En effet, si la fraction en carbone organique du sol est inférieure à 1 %, l'adsorption sur le carbone organique ne sera pas immédiate. Il y a une valeur critique de f_{oc} à partir de laquelle la sorption sur la matière organique est égale à la sorption sur la matière minérale. En dessous de ce seuil critique (f_{oc}*), les molécules organiques sont adsorbées sur les surfaces minérales (McCarty *et al*., 1981).

Pour le site étudié, aucun coefficient de retard n'est connu, les valeurs de f_{oc}, K_{oc} et de densité sont extraites de la bibliographie. Les valeurs de f_{oc} et K_{oc} constituent des paramètres de calage (cf. Tableau 6).

Tableau 6 : Valeurs et domaines de variation retenus comme données d'entrées pour le phénomène d'adsorption - BIOCHLOR

Paramètre	Valeur et domaine de variation	Paramètre de calage
d	1,7 kg/L	Non
f_{oc}	0,0002 à 0,001	Oui
K_{oc} PCE	209 à 389 L/kg	Oui
K_{oc} TCE	87 à 150 L/kg	Oui
K_{oc} DCE	36 à 89 L/kg	Oui
K_{oc} CV	0,4 à 56 L/kg	Oui

Biodégradation

Des temps de demi-vie ou des coefficients de dégradation doivent être intégrés afin de prendre en compte la biodégradation sous forme de décroissance séquentielle du 1er ordre.

Pour définir la biodégradation, deux options sont proposées :

- une seule zone (anaérobie) ;
- deux zones avec une zone anaérobie (proche de la source) puis une zone aérobie dans la direction de l'écoulement.

Dans le cas présent, une seule zone a été considérée, les coefficients de dégradation constituent des paramètres de calage.

Les domaines de variation retenus sont extraits du cahier des charges et extraits de la bibliographie (cf. Tableau 7). Cependant, des valeurs issues d'un calcul basé sur les concentrations observées et des sources bibliographiques sont également proposées en première approche par le logiciel.

Tableau 7 : Domaines de variation retenus comme données d'entrées pour le phénomène de biodégradation - BIOCHLOR

Paramètre	Domaine de variation	Paramètre de calage
λ PCE	0,07 à 1,2 an^{-1}	Oui
λ TCE	0,05 à 0,9 an^{-1}	Oui
λ cis 1,2-DCE	0,18 à 3,3 an^{-1}	Oui
λ CV	0,12 à 2,6 an^{-1}	Oui

<u>Informations générales</u>

Le temps de simulation, la taille (largeur et longueur) de la zone d'étude voire des deux zones de biodégradation sont à définir. La taille du modèle doit être assez importante pour anticiper l'extension du panache (cf. Tableau 8).

Tableau 8 : Informations générales - BIOCHLOR

Paramètre	Valeur	Paramètre de calage
Durée	10 ans	Non
Largeur du modèle	500 pieds	Non
Longueur du modèle	5000 pieds	Non

<u>Source</u>

Plusieurs options sont proposées par le logiciel pour définir la zone source. Tout d'abord, il y a la possibilité de choisir entre une source finie (décroissance de la concentration au cours de la simulation) ou infinie (valeur fixée).

Par la suite, dans le cas d'une source constante, il est possible de simuler (cf. Figure 8) :

- une zone source homogène (approche conservatoire) ;
- une zone source hétérogène dont les concentrations varient (et décroissent) entre le centre de la zone source et la bordure (3 zones sont définies).

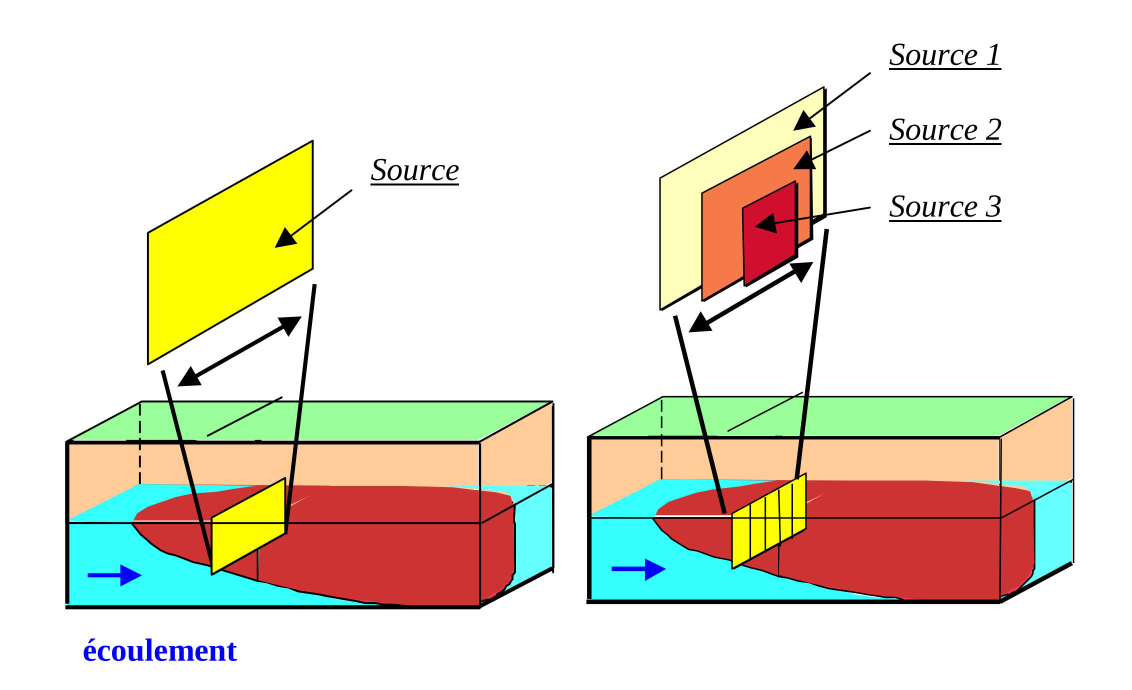


Figure 8 : Définition de la zone source
(homogène à gauche et hétérogène à droite)

Ces choix, comme les précédents, sont à justifier par les données disponibles (sondages, résultats analytiques, retour d'expérience ou encore information relative à l'historique du site).

Pour ce qui concerne le CR3, comme le suggère le manuel d'utilisation, la zone source considérée est homogène et s'étend sur 10 m de large (32 pieds) entre les ouvrages S2, S3 et Botex qui semblent être les zones où les concentrations sont les plus élevées en polluants (PCE, TCE et DCE). Son épaisseur est de l'ordre de 10 m (32 pieds) ce qui représente toute la ZS (hypothèse majorante).

Considérant que les informations relatives à la zone source sont peu nombreuses, une zone source constante a été définie dans un premier temps, avec la présence des 3 polluants PCE, TCE et DCE. Par la suite une source finie avec PCE, TCE, DCE puis seulement le PCE ont également été testées (cette dernière hypothèse suit la préconisation du cahier des charges).

Le Tableau ci-dessous reprend les valeurs utilisées pour la phase de calage des concentrations.

Tableau 9 : Valeurs retenues comme données d'entrées pour la source de pollution - BIOCHLOR

Paramètre	Valeur	Paramètre de calage
Epaisseur	30 pieds	Oui
Largeur de la zone	30 pieds	Oui
[PCE]	5 mg/L	Oui
[TCE]	0,5 mg/L	Oui
[DCE]	1 mg/L	Oui

Données observées pour comparaison

Le centre de la zone source a été défini en X (472724) et Y (4646448). La phase de calage des concentrations nécessite le calcul de la distance entre la source et chacun des points d'observation (cf. Tableau 10).

Les concentrations mesurées (cf. Quiot, 2004) ont été utilisées pour le calage entre concentrations calculées et observées (en particulier celles du 16 novembre 2000 - 1801 j).

Les points d'observation ont été choisis en fonction du modèle et de ses caractéristiques (voir ci-après les 3 modèles réalisés), néanmoins PL ou Arids Vilanna ont toujours été employés comme point de calage (ouvrages les plus en aval présentant un enjeu).

Tableau 10 : Points d'observation - BIOCHLOR

Nom	UTM X	UTM Y	Distance à la source	
	(m)	(m)	(m)	(pieds)
QS-1	472611	4646632	198,11	649,81
QS-2	472716	4646487	33,02	108,30
PL2	472664	4646700	254,72	835,47
BV	472720	4646618	165,09	541,51
PL	472750	4646875	448,11	1470,20
S-2	472691	4646460	14,15	46,42
S-3	472722	4646475	23,58	77,36
S-4	472745	4646480	23,11	75,81
S-5	472762	4646500	42,45	139,25
S-6	472792	4646520	51,89	170,19
PR-1	472700	4646464	14,15	46,42
PR-2	472696	4646462	15,09	49,51
PR-3	472712	4646570	117,92	386,79
Surroca II	472631	4646503	70,75	232,08
Botex	472749	4646470	14,15	46,42
Àrids Vilanna	473080	4646920	754,72	2475,47
Edilkamin	472782	4646714	264,15	866,42

3.2.4 RESULTATS DE BIOCHLOR

3 modèles ont été réalisés, avec des hypothèses différentes quant à la zone source afin de tester l'influence de ce choix :

- source infinie de PCE, TCE et DCE (modèle BIOCHLOR 1) ;
- source finie de PCE, TCE et DCE (modèle BIOCHLOR 2) ;
- source finie de PCE (modèle BIOCHLOR 3).

Dans le cadre de cet exercice et de ce rapport, les résultats sont présentés sans les tests de sensibilité conduits au final.

BIOCHLOR 1 : Source infinie de PCE, TCE et DCE

La source est composée majoritairement de PCE, de TCE et de DCE.

Les concentrations mesurées le 16 mars 2000 et le 16 novembre 2000 (respectivement 4,24 ans et 4,93 ans de simulation, soit 1547 et 1801[8] j) ont été utilisées pour le calage.

Les résultats de simulation sont présentés ci-après (échelle Log, cf. Figure 9 et

Figure 10).

Le calage des ouvrages de surveillance aval a été privilégié. Cette comparaison montre que l'évolution dans l'espace des concentrations calculées concorde avec les valeurs mesurées.

Les paramètres associés sont donnés au Tableau 14.

Pour information, le bilan de masse est présenté ci-dessous.

Tableau 11 : Bilan massique à 1801 j – BIOCHLOR 1

1801 j	**PCE**	**TCE**	**DCE**	**CV**
Masse dans le panache sans biodégradation	31,8	0,5	2,1	0
Masse dans le panache avec biodégradation	21,7	0,4	1,7	0,1
Masse sortie	10,1	0,2	0,5	-0,1
% Biodégradé	31,8	33,1	22	
% Bilan de masse	100	100	100	

Remarque :

Le manuel d'utilisation de BIOCHLOR (Aziz *et al.*, 2000) précise que pour les substances filles produites (dans notre cas TCE, DCE et CV), le bilan de masse peut donner une masse de sortie du système négative (cf. Tableau 11, pour le CV). Cette valeur négative semble provenir du fait que la masse dans le panache soit exclusivement liée à la biodégradation.

[8] 1801 j / 365,25 donne 4,93 ans de simulation.

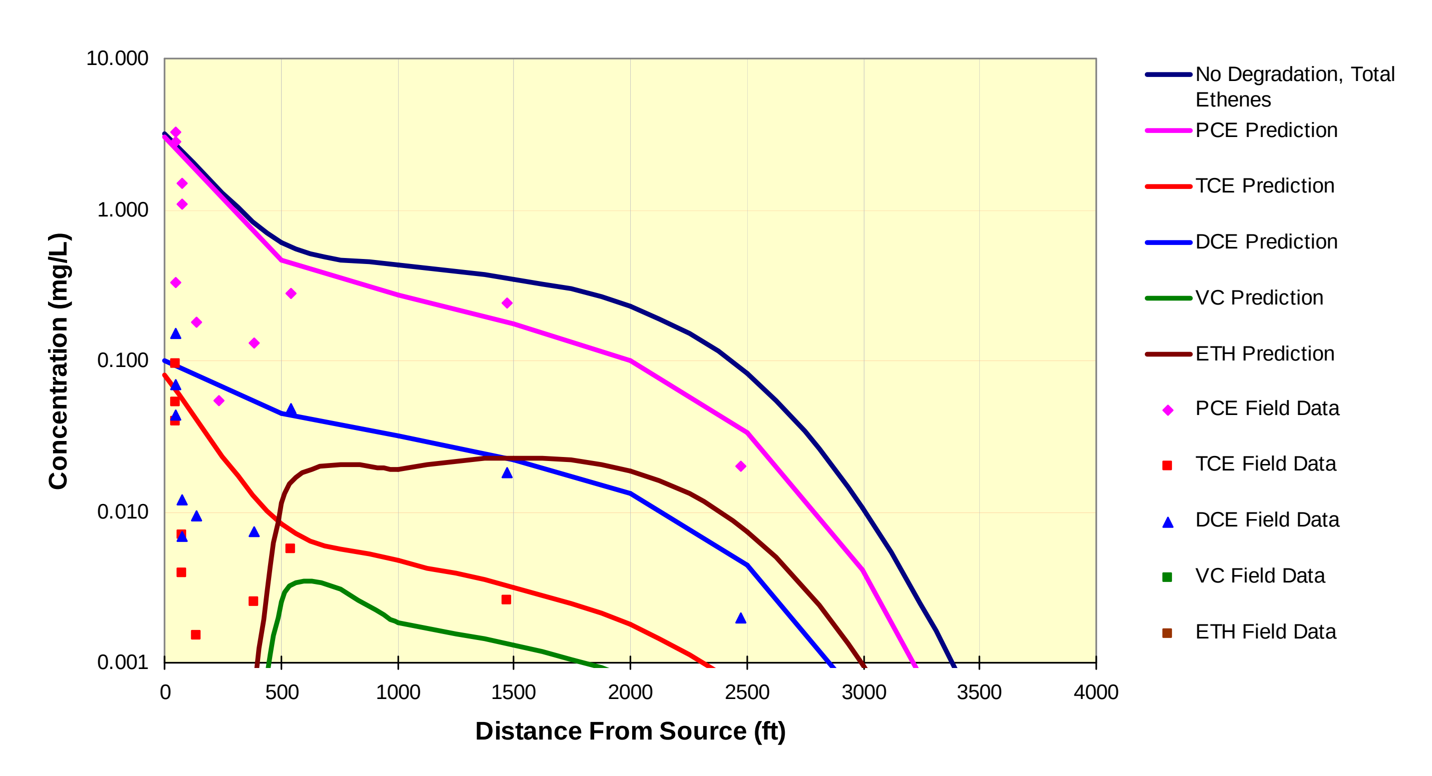


Figure 9 : Résultats des simulations pour le modèle BIOCHLOR 1 à 1547 j de simulation

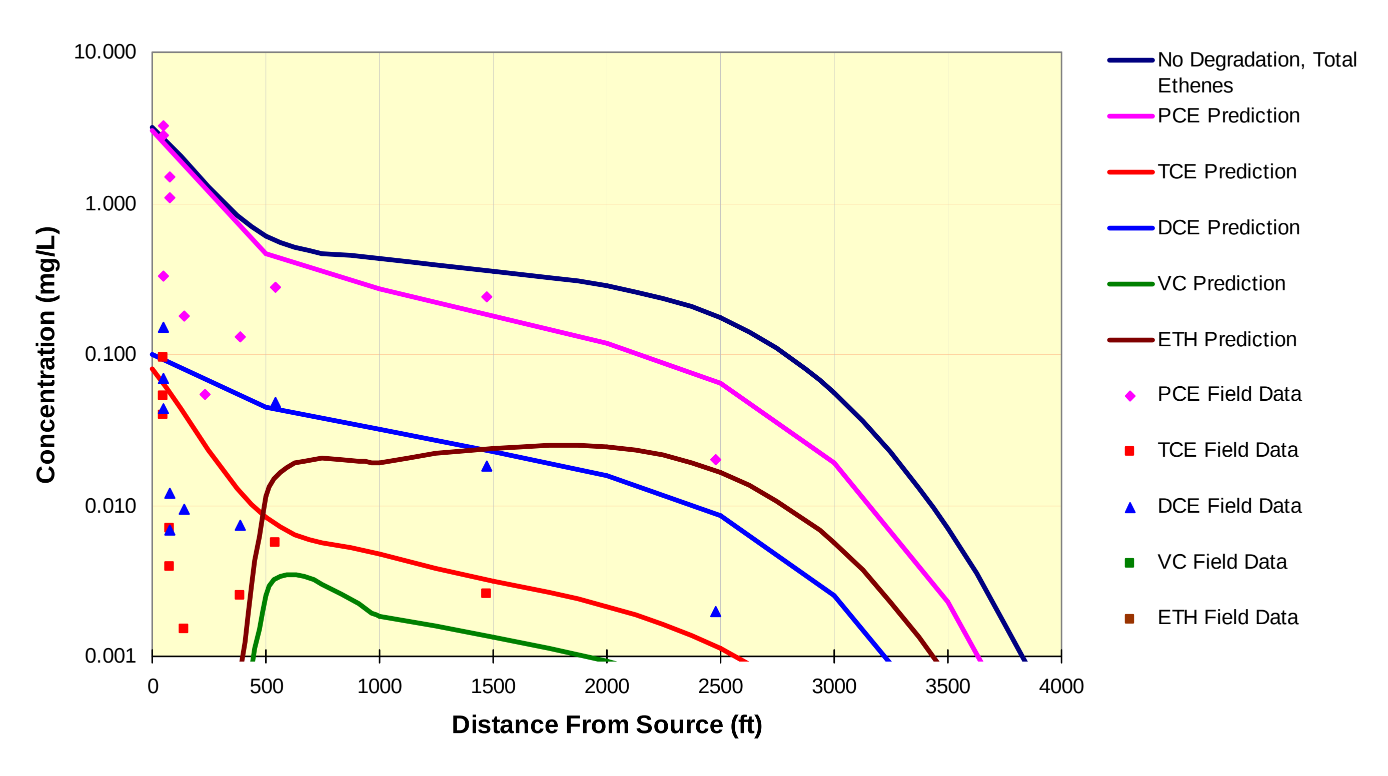


Figure 10 : Résultats des simulations pour le modèle BIOCHLOR 1 à 1801 j de simulation

Source finie de PCE, TCE et DCE, BIOCHLOR 2

La source est composée majoritairement de PCE, de DCE et de TCE avec un coefficient de décroissance ajusté par calage (0,1 an^{-1}).

Les concentrations mesurées à 1801, 2170 (20 novembre 2001 ; 5,94 ans) et 3521 j (2 août 2005, 9,64 ans) ont été utilisées pour le calage.

Les résultats sont présentés ci-après (Figure 11, Figure 12 et Figure 13). L'évolution dans l'espace des concentrations calculées concorde avec les valeurs mesurées.

Les paramètres associés sont donnés au Tableau 14.

Le bilan de masse est présenté ci-dessous.

Tableau 12 : Bilan massique à 3521 j – BIOCHLOR 2

3521 j	PCE	TCE	DCE	CV
Masse dans le panache sans biodégradation	49,5	1,2	3	0
Masse dans le panache avec biodégradation	25,1	0,5	1,6	0,1
Masse sortie	24,4	0,8	1,4	-0,1
% Biodégradé	49,3	60,8	45,4	
% Bilan de masse	100	100	100	

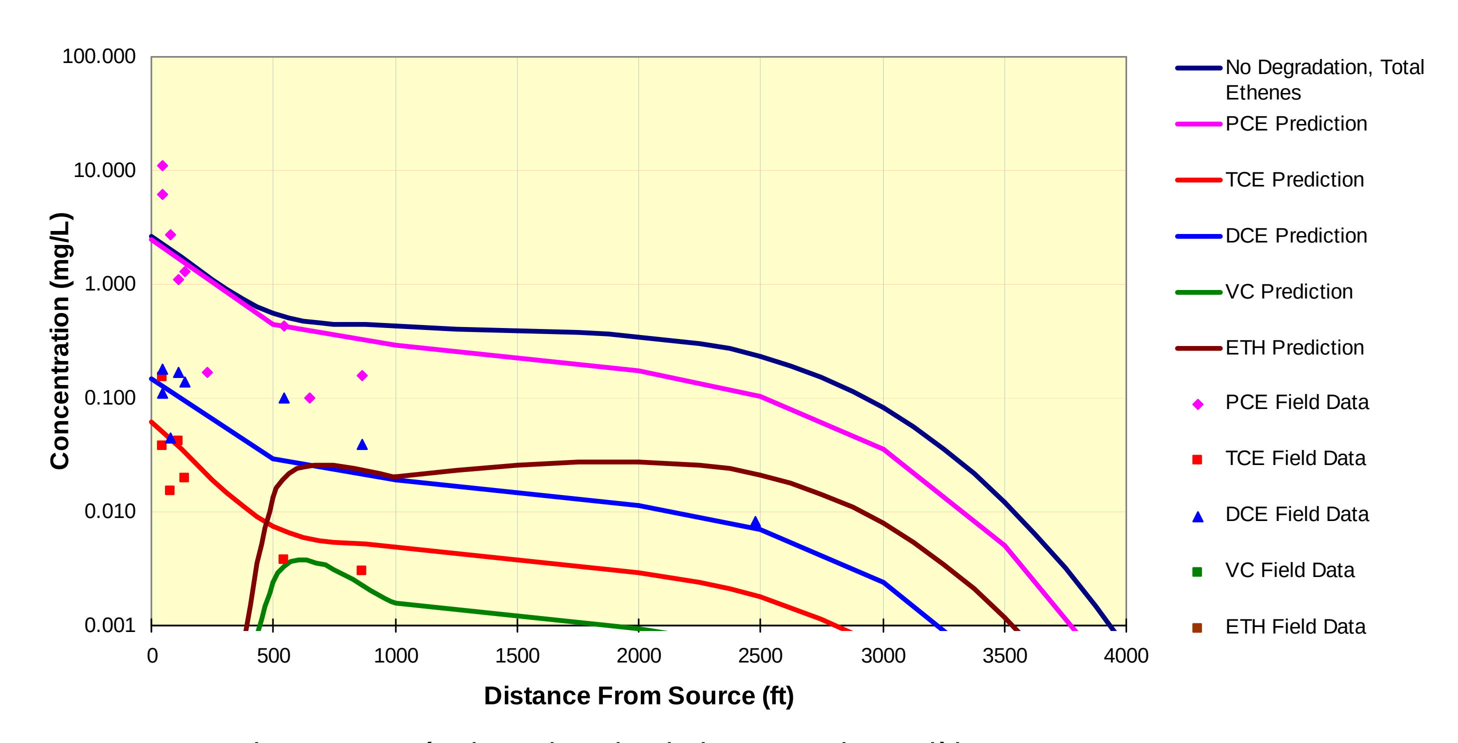


Figure 11 : Résultats des simulations pour le modèle BIOCHLOR 2 à 1801 j de simulation

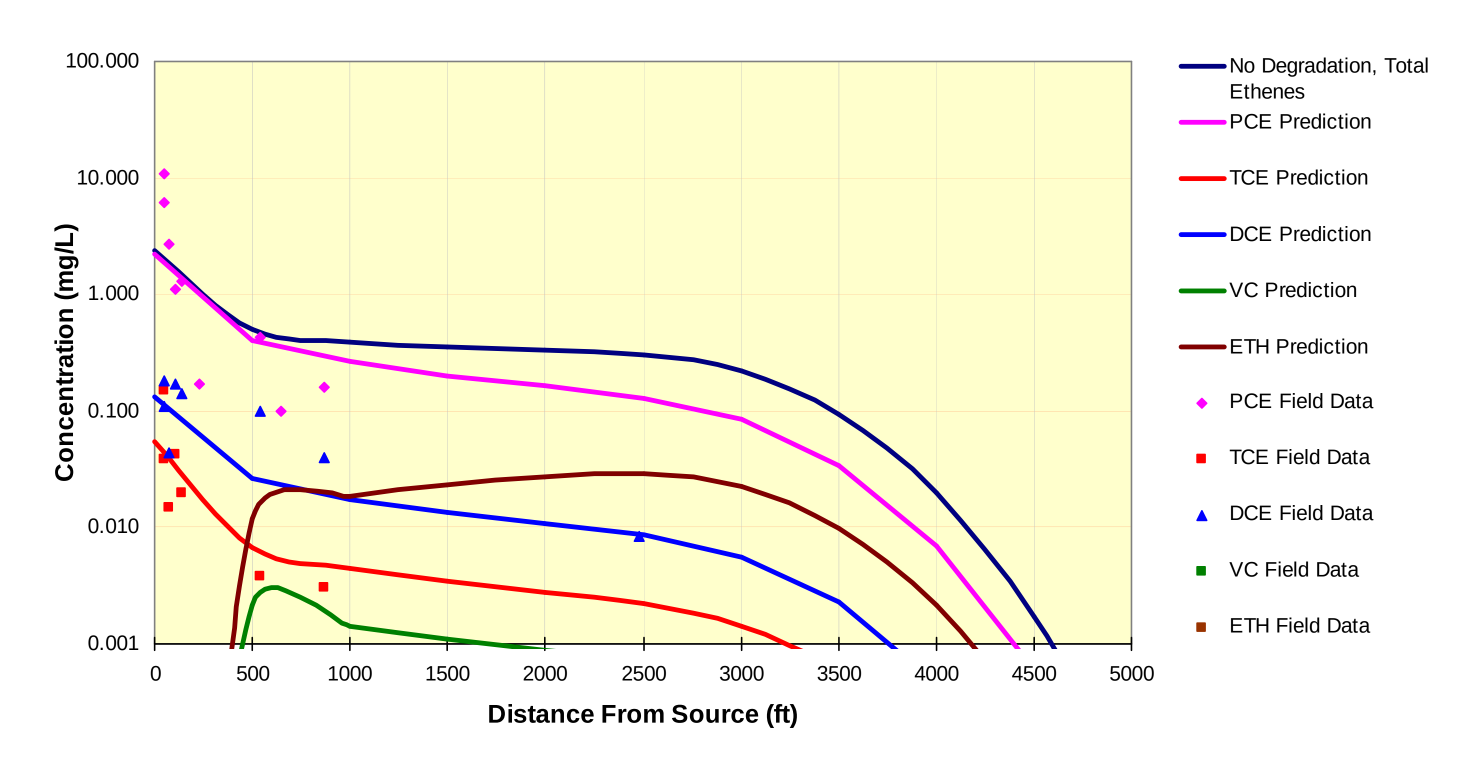


Figure 12 : Résultats des simulations pour le modèle BIOCHLOR 2 à 2170 j de simulation

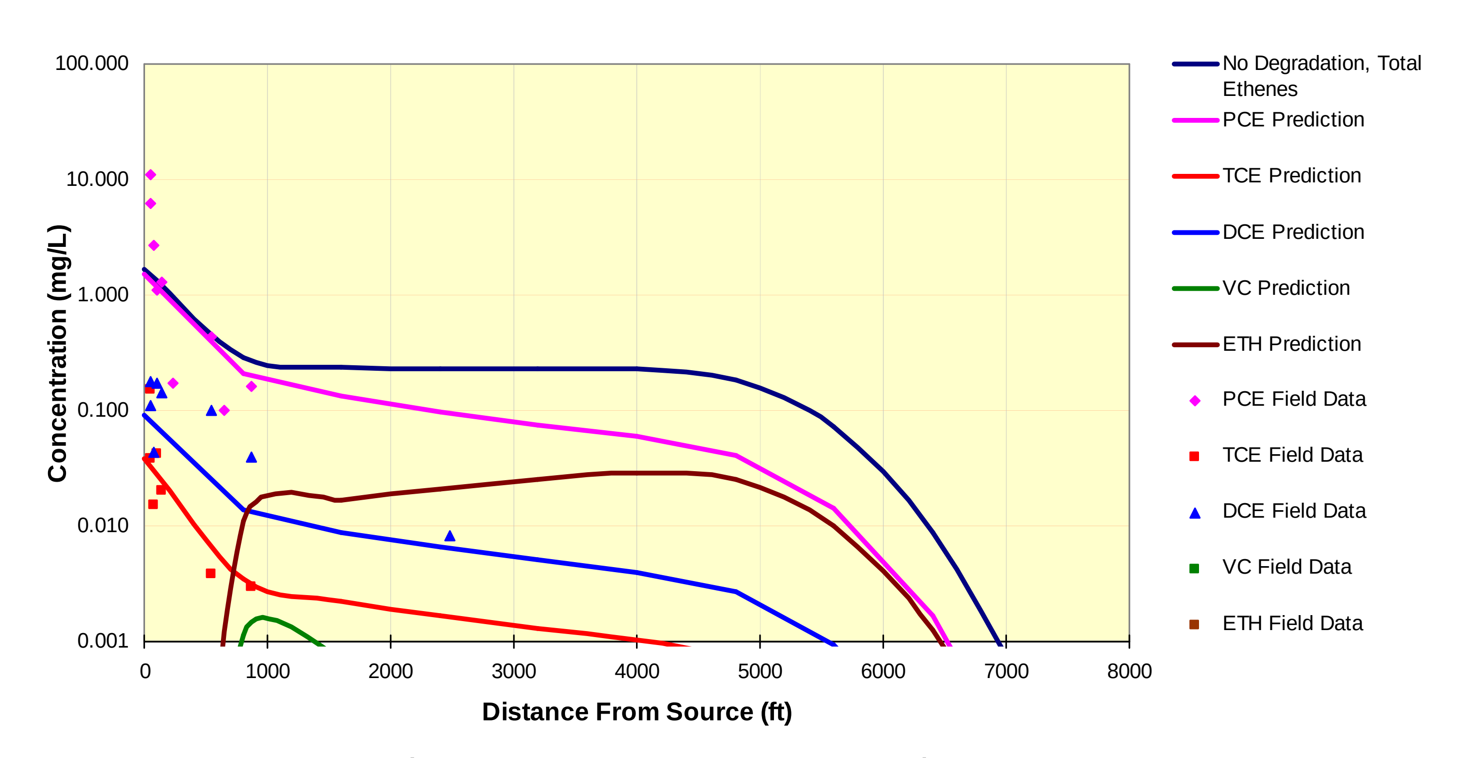


Figure 13 : Résultats des simulations pour le modèle BIOCHLOR 2 à 3521 j de simulation

Source finie de PCE BIOCHLOR 3

La source est composée exclusivement de PCE, comme proposé dans le cahier des charges et d'après les informations historiques. Un coefficient de décroissance est également appliqué (après calage 0,1 an^{-1}).

Ce modèle est équivalent au précédent (BIOCHLOR 2) si ce n'est les concentrations en TCE et DCE qui ne sont plus affectées à la zone source.

Les concentrations mesurées à 1801 j et 3521 j (2 août 2005, 9,64 ans) ont été utilisées pour le calage.

Les résultats entre les modèles 2 et 3 sont sensiblement similaires au début car le poids prépondérant de la concentration en PCE à la source contraint le modèle.

Les résultats à 3521 j de simulation sont présentés ci-après (Figure 14 et Figure 15). L'évolution dans l'espace des concentrations calculées concorde avec les valeurs mesurées.

Les paramètres associés sont donnés au Tableau 14.

Le bilan de masse est présenté ci-dessous.

Tableau 13 : Bilan massique à 3521 j – BIOCHLOR 3

3521 j	PCE	TCE	DCE	CV
Masse dans le panache sans biodégradation	31,5	0	0	0
Masse dans le panache avec biodégradation	22	0,3	1	0,1
Masse sortie	9,5	-0,3	-1	-0,1
% Biodégradé	30,1			
% Bilan de masse	99,9			

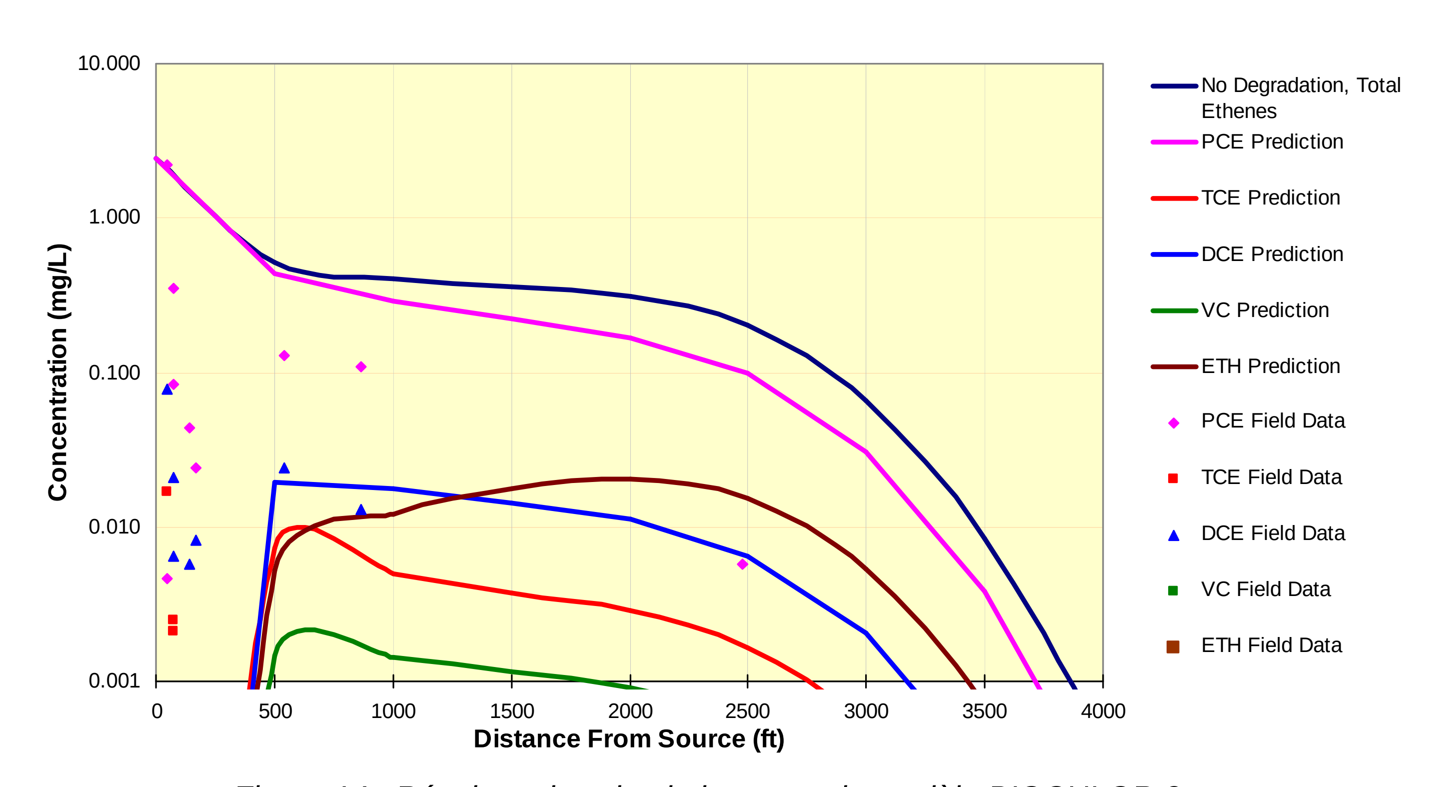


Figure 14 : Résultats des simulations pour le modèle BIOCHLOR 3 à 1801 j de simulation

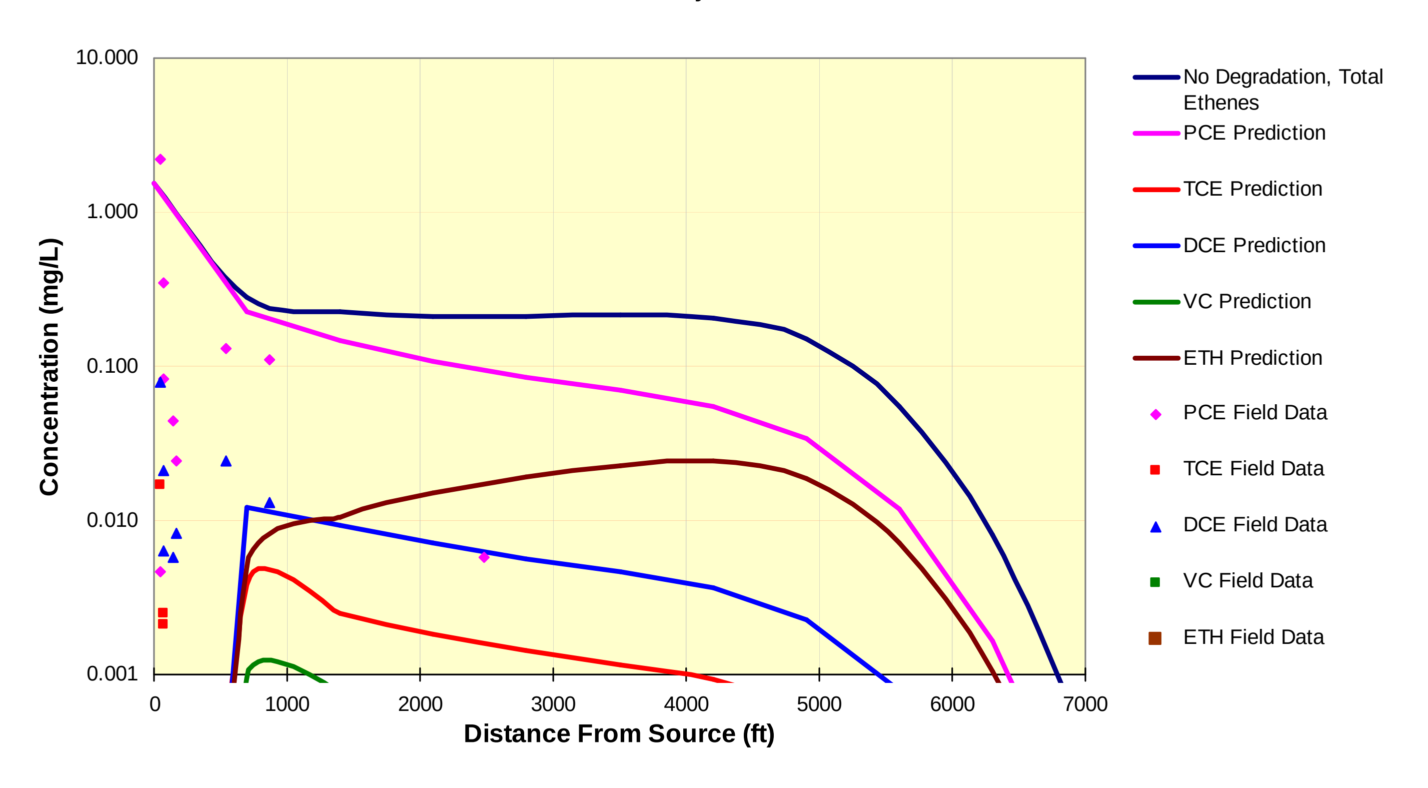


Figure 15 : Résultats des simulations pour le modèle BIOCHLOR 3 à 3521 j de simulation

Une synthèse des paramètres retenus suite à la phase de calage des concentrations est présentée ci-dessous.

Tableau 14 : Synthèse des paramètres de calage - BIOCHLOR

	BIOCHLOR 1	**BIOCHLOR 2**	**BIOCHLOR 3**
Coefficient de perméabilité (m/d)	66	66	66
Gradient hydraulique	0,001	0,001	0,001
n_e	0,1	0,1	0,1
f_{oc}	0,0002	0,0002	0,0002
αL (m)	9,4	11,6	11,6
αT (m)	0,9	1,2	1,2
K_{oc} PCE (L/kg)	760	760	760
K_{oc} TCE (L/kg)	130	130	130
K_{oc} cis 1,2-DCE (L/kg)	125	125	125
K_{oc} CV (L/kg)	30	30	30
λ PCE (an^{-1})	0,3	0,25	0,25
λ TCE (an^{-1})	15	12	12
λ cis 1,2-DCE (an^{-1})	2,5	2,5	2,5
λ CV (an^{-1})	20	20	20
Epaisseur source (m)	9,1	9,1	9,1
Largeur source (m)	9,1	9,1	9,1
[PCE] initiale (mg/L)	3	4	4
[TCE] initiale (mg/L)	0,05	0,1	0
[DCE] initiale (mg/L)	0,2	0,24	0
Coefficient de tarissement de la source (an^{-1})		0,1	0,1

Du point de vu conceptuel, le second modèle semble le plus intéressant car même s'il s'éloigne du cahier des charges (celui-ci recommande seulement du PCE à la source d'après données historiques et sans tarissement sur les 5 premières années de simulation – BIOCHLOR 1), il permet de simuler :

- la présence de TCE et de DCE au niveau de la zone source ;
- une décroissance des concentrations au niveau de la zone source.

En effet, ceci est mis en évidence par les résultats d'analyses (notamment au niveau de S-2, S-3).

En terme de concentrations, les variations observées entre le second et le troisième modèle sont faibles du fait de la prépondérance du PCE (PCE en concentration plus importante à la source et biodégradation plus rapide du TCE et du DCE).

3.2.5 REMARQUES RELATIVES A L'UTILISATION DE BIOCHLOR DANS LE CADRE DU CR3

Conceptualisation

Cet outil permet de se conformer au cahier des charges et au modèle conceptuel du site (homogène, écoulement permanent, déchloration réductrice).

Par contre, un seul coefficient de retard est assigné à toutes les substances simulées.

Source

Les différentes options disponibles sont intéressantes mais elles ne permettent pas de représenter l'injection de PCE telle que recommandée dans le cahier des charges, à savoir stable durant les 5 premières années puis décroissante sur les 5 années suivantes.

Paramètre et calibration

Le calage des charges n'est pas réalisable (modèle analytique de transport de polluants).

Des solutions empiriques permettent de déterminer certains paramètres (dispersivité ou K_{oc}) et des données bibliographiques sont également proposées. Cependant, pour ces dernières, il ne semble pas possible de consulter la source et de s'assurer de la similitude des terrains étudiés.

Le calage des concentrations est délicat car on ne peut comparer les données observées et calculées qu'à une seule date. Ainsi, il faut réaliser plusieurs feuilles Excel pour caler à plusieurs dates (comme dans l'exemple BIOCHLOR 2, où pour 3 dates, on a 3 feuilles de calcul et une modification dans l'une nécessite de changer les autres aussi).

Les concentrations calculées ne sont fournies que pour 11 points répartis le long de la ligne de flux et avec un espace identique. Ce dernier est fonction de la taille du modèle (longueur et largeur).

Pour avoir des résultats intermédiaires, il faut recourir à une interpolation, ce qui peut introduire une erreur supplémentaire ou déterminer la valeur recherchée à partir des graphiques proposés (méthode employée par la suite).

Bilan de masse

Une option très pratique permet de visualiser les résultats avec ou sans biodégradation.

Utilisation

L'interface est simple à appréhender.

Les unités sont anglo-saxonnes mais de nombreuses pages web permettent de convertir rapidement les valeurs (exemple http://unit-converter.org/).

Simple d'utilisation et rapide à mettre en œuvre, cet outil se révèle bien adapté aux COHV et particulièrement à la simulation du phénomène de biodégradation. Il est utilisé depuis de nombreuses années, ce qui permet également au fil des versions d'avoir un outil de plus en plus performant.

En outre, le manuel d'utilisation est assez complet, les équations et méthodes de calcul y sont clairement décrites.

3.3 NAS

3.3.1 PRESENTATION DE NAS

Naturel Attenuation Software (NAS) est un modèle utilisant une combinaison entre solution analytique et numérique.

Au travers de 3 modules, NAS permet d'estimer :

– le niveau de réduction à engager sur le terme source (traitement) pour obtenir une concentration donnée en aval - équivalente à un seuil réglementaire par exemple (Distance Of Stabilization, DOS) ;

– le temps associé à la stabilisation voire à la réduction du panache suite au traitement de la source (Time Of Stabilization, TOS) ;

– le temps pour lequel une atténuation naturelle de la pollution permet d'atteindre un seuil de concentration donné en aval (Time Of Remediation, TOR).

Cet outil traite les phénomènes d'advection, de dispersion, de sorption et de biodégradation. Il fait également intervenir la dissolution des liquides en phase non aqueuse (LPNA ou DNAPL en anglais).

NAS peut être employé dans le cadre de simulations portant sur des aquifères poreux, relativement homogènes de lithologie sablo-graveleuse. Il simule exclusivement la ZS.

Les polluants considérés sont les hydrocarbures et les organochlorés (chlorométhane, chloroéthène, chloroéthane).

A minima les informations nécessaires à la mise en œuvre d'une simulation sont les données hydrogéologiques, d'oxydoréduction, les concentrations observées et l'extension du site. Ces informations permettent dans un premier temps d'estimer le flux écoulé, le taux de biodégradation et de sorption à considérer.

Comme dit précédemment, NAS utilise une combinaison entre solution analytique et numérique.

La solution analytique (Domenico, 1987) permet de déterminer :

- quel est l'objectif de dépollution de la zone source et la distance de stabilisation du panache (DOS) ;

- au bout de combien de temps le régime permanent sera de nouveau atteint suite à une modification de la source (traitement) (TOS).

Une solution numérique via le couplage aux codes SEAM3D (partie transport) et MODFLOW (partie écoulement) semble être employée dans le cadre de la détermination du temps de remédiation (TOR) mais ce calcul n'a pas été réalisé.

Pour de plus amples informations le lecteur est invité à consulter le manuel d'utilisation (cf. Natural Attenuation Software (NAS) (2005). User's Manuel Version 2).

3.3.2 REALISATION D'UN MODELE NAS

Le modèle développé dans le cadre de cet essai d'intercomparaison est présenté succinctement ci-après en suivant l'ordre d'entrée des informations demandées par le modèle. Les informations relatives au site doivent être introduites dans 5 onglets différents (cf. Figure 5).

Comme pour BIOCHLOR, les valeurs recommandées dans le cahier des charges (Rollin, 2003) ainsi que les résultats d'une précédente recherche bibliographique (Quiot, 2004) ont été utilisés pour débuter les simulations.

Généralités

Les unités du SI ont été retenues (mètre, kilogramme, jour).

Caractéristiques hydrogéologiques et propriétés de l'aquifère

Pour ce qui concerne la perméabilité, le gradient hydraulique et la teneur en matière organique, des domaines de variation sont demandés.

En première approche, une zone source située entre S-2 et Botex a été considérée (sur l'ensemble de la ZS).

Polluants

Les substances polluantes considérées ont été définies comme étant des chloroéthènes avec le PCE comme origine (chaîne de dégradation PCE-TCE-cis DCE-CV). Pour ces substances, il a fallu reporter différentes valeurs dont le K_{oc} et la solubilité (choix par défaut).

Données analytiques relatives aux concentrations observées

Les concentrations mesurées au 16 novembre 2000 (1801 j) ont été utilisées pour le calage des concentrations.

Les informations demandées sont, la date d'échantillonnage, le nombre d'ouvrages de surveillance, la distance de ces derniers à la source et les concentrations mesurées.

Les points d'observation pour lesquels des informations ont été données sont S-2, S-3, S-5, PR-3, BV, PL et Arids Vilanna.

Données Redox

D'autres informations concernant les caractéristiques redox doivent être introduites. Les résultats de la campagne en date du 2 août 2005 ont permis de renseigner ces champs pour S-2, S-3, S-5, Botex et BV (nitrates, O_2, sulfates et méthane).

Paramètres estimés par le logiciel

Le logiciel calcule automatiquement les paramètres suivants sans que ces derniers puissent être modifiés (en fonction des données spécifiées précédemment) : facteur de retard, longueur du panache, dispersivité longitudinale et transversale, taux de dégradation du PCE, TCE, DCE et CV.

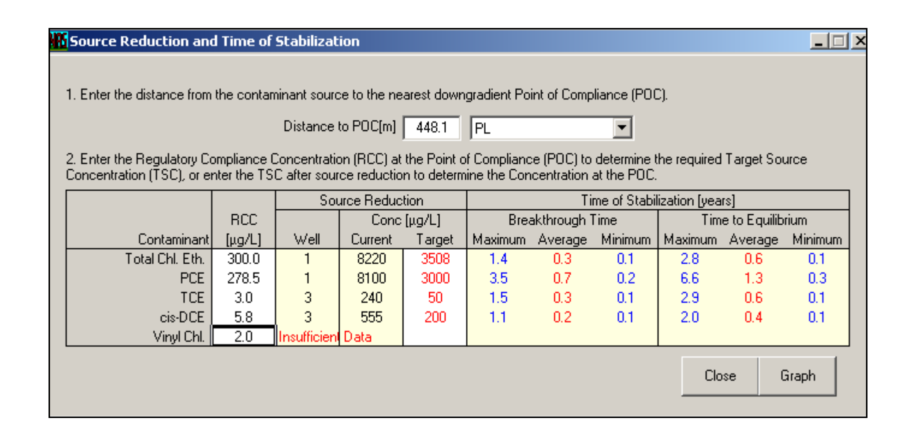
3.3.3 RESULTATS NAS

NAS ne permet pas véritablement de fixer la concentration du terme source pour caler les concentrations en aval. En effet, l'utilisation de NAS et en particulier du

module DOS/TOS permet de calculer la concentration à atteindre dans la zone source pour avoir en un point d'observation ou à enjeu donné (AEP) un objectif de concentration respecté (seuil réglementaire).

La méthodologie employée ici a donc consisté à retrouver des concentrations mesurées au temps de calage 1801 j (panache stabilisé) au niveau de la source (cf. présentation de la source pour BIOCHLOR et concentrations initiales retenues pour BIOCHLOR 1, Tableau 14, 3000 µg/L en PCE, 50 µg/L en TCE et 200 µg/L en DCE) en ajustant les concentrations souhaitées au point de surveillance considéré (S-2, …PL et Arids Vilanna noté AV).

La figure ci-dessous présente la table de calcul utilisée et l'exemple de PL. Les parties en jaune sont calculées par NAS et ne peuvent pas être modifiées. Les concentrations au niveau de la zone source mesurées le 16 novembre 2000 ont été recherchées dans la colonne Target, en modifiant les concentrations présentées dans la colonne RCC (PL).



		Source Reduction			Time of Stabilization [years]					
	RCC		Conc [µg/L]		Breakthrough Time			Time to Equilibrium		
Contaminant	[µg/L]	Well	Current	Target	Maximum	Average	Minimum	Maximum	Average	Minimum
Total Chl. Eth.	300.0	1	8220	3508	1.4	0.3	0.1	2.8	0.6	0.1
PCE	278.5	1	8100	3000	3.5	0.7	0.2	6.6	1.3	0.3
TCE	3.0	3	240	50	1.5	0.3	0.1	2.9	0.6	0.1
cis-DCE	5.8	3	555	200	1.1	0.2	0.1	2.0	0.4	0.1
Vinyl Chl.	2.0	Insufficient	Data							

Figure 16 : Méthodologie retenue, exemple PL – NAS

Cette méthode ne permet pas de réaliser une simulation prédictive et de calculer la concentration à attendre au droit d'un ouvrage de surveillance.

Des graphiques permettent d'afficher l'évolution des concentrations calculées en fonction de la distance à la source et au cours du temps en un point donné. Il est également possible d'observer l'effet du traitement de la source sur les concentrations via notamment l'option de visualisation "transiant solution graph".

Les concentrations calculées par rapport à celles observées sont présentées ci-dessous ainsi que les paramètres retenus.

La solution de Domenico étant également employée par NAS, la vérification présentée au paragraphe 3.2.1 a été réalisée et le nombre de Peclet reste supérieur à 10 pour les points d'observation retenus.

Les résultats sont présentés ci-après (Tableau 15 et Tableau 16).

Tableau 15 : Concentrations calculées - NAS

Point d'observation	S-3	S-5	PR-3	BV	PL	AV
Distance à la source (m)	23,6	42,5	117,9	165,1	448,1	754,7
PCE (µg/L) mesuré le 16 novembre 2000	1700	1800	135	360	290	41
PCE (µg/L) calculé le 16 novembre 2000	1822	1400	800	643	279	147
TCE (µg/L) mesuré le 16 novembre 2000	240	6	0,1	2,8	2,2	2,1
TCE (µg/L) calculé le 16 novembre 2000	*	32	14	10	3	1,1
DCE (µg/L) mesuré le 16 novembre 2000	555	35	50	4	8,2	2,6
DCE (µg/L) calculé le 16 novembre 2000	*	126	47	32	5,7	1,2

* non calculée par NAS car trop proche de la zone source

Tableau 16 : Synthèse des paramètres de calage - NAS

	NAS
Coefficient de perméabilité (m/d)	600
Gradient hydraulique	0,001
n_e	0,1
f_{oc}	0,0002
αL[1] (m)	13,45
αT[1] (m)	0,67
K_{oc} PCE (L/kg)	760
K_{oc} TCE (L/kg)	195
K_{oc} cis 1,2-DCE (L/kg)	65
K_{oc} CV (L/kg)	57
λ PCE (an^{-1}) [1]	2,74
λ TCE (an^{-1}) [1]	5,55
λ cis 1,2-DCE (an^{-1}) [1]	9,53
Epaisseur source (m)	10
Largeur source (m)	10
Longueur source (m)	1
[PCE] initiale (mg/L)	3
[TCE] initiale (mg/L)	0,05
[DCE] initiale (mg/L)	0,2

[1] : Paramètres calculés automatiquement par NAS

3.3.4 REMARQUES RELATIVES A L'UTILISATION DE NAS DANS LE CADRE DU CR3

Conceptualisation

La dégradation séquentielle de 1er ordre ne peut être simulée avec NAS (taux de biodégradation calculé automatiquement).

Source

La source est constante.

NAS détermine, au vu des données introduites, les conditions redox et peut créer jusqu'à 4 zones où sont appliquées des coefficients de biodégradation différents. Dans notre cas une seule zone a été considérée par le modèle.

Paramètre et calibration

Le calage des charges n'est pas réalisable (modèle analytique de transport de polluants).

Des paramètres sont automatiquement définis à partir des informations données : facteur de retard, longueur du panache, dispersivité longitudinale et transversale, taux de dégradation du PCE, TCE, DCE et CV.

Le fait de calculer automatiquement des paramètres sans moyen de les modifier peut introduire un biais non négligeable car certaines données peuvent être de qualité médiocre…. Ainsi, la qualité des données analytiques et autres introduites dans ce modèle joue un rôle très important (c'est le cas dans tous les modèles mais ici des paramètres essentiels sont estimés sur la base de ces données et ne peuvent être modifiés).

La procédure de calage proprement dite n'a pas été réalisée, elle a été adaptée et les paramètres de calage présentés précédemment (cf. paragraphe dévolus à BIOCHLOR) n'ont pas été utilisés pour retrouver par le calcul les concentrations observées.

Bilan de masse

Il n'y a pas d'option permettant de vérifier le bilan de masse.

Utilisation

Les unités du SI sont disponibles ce qui évite une étape de conversion, source d'erreur potentielle.

Des exemples sont également disponibles mais le manuel d'utilisation est incomplet. En effet, les équations et méthodes de calcul employées notamment pour déterminer automatiquement certains paramètres ne sont pas présentées.

Simple d'utilisation et rapide à mettre en œuvre, cet outil se révèle néanmoins inadapté au cadre du CR3. En effet, il est plus particulièrement adapté aux questions relatives au traitement d'une source et à la définition d'objectifs de dépollution, ce qui montre bien la nécessité de choisir un outil adapté aux objectifs.

3.4 COMPARAISON AVEC MODELES NUMERIQUES ET RESULTATS DE LA SECONDE PHASE D'INTERCOMPARAISON DU CR3

Pour rappel sont présentés ci-dessous les principaux avantages et inconvénients identifiés suite à l'utilisation de BIOCHLOR et NAS.

Tableau 17 : Synthèse des principales remarques concernant l'utilisation de BIOCHLOR et NAS dans le cadre du CR3

	BIOCHLOR	**NAS**
Conceptualisation	Adapté aux COHV Dégradation séquentielle du 1er ordre Un seul coefficient de retard	Principalement destiné à évaluer les objectifs de dépollution d'une source Pas de dégradation séquentielle du 1er ordre
Source	Option permettant de considérer une source variable dans l'espace mais pas dans le temps	Source constante dans l'espace et dans le temps
Paramètres et calibration	Calage des concentrations (calculs/mesures) à une seule date et pour quelques ouvrages de surveillance	Comparaison calculs/mesures non disponible directement Définition par le calculs de plusieurs paramètres (sans ajustement possible)
Bilan de masse	Option pratique permettant de visualiser l'effet de la biodégradation	Non disponible
Utilisation	Interface simple à appréhender mais unités anglo-saxonnes (nécessite une étape de conversion) Manuel d'utilisation et exemples	Le manuel est incomplet (notamment pour justifier les calculs des paramètres). Exemples disponibles

Les résultats des modèles précédents sont comparés ci-après à ceux obtenus par les équipes modélisatrices au cours de la seconde phase d'intercomparaison du CR3 (Etape 1) : ANTEA, ENVIROS et INERIS (cf. Quiot, 2006). Les outils de calcul employés par ces différentes équipes sont respectivement : MARTHE, TRANSIN et MODFLOW/RT3D, cf. tableau ci-dessous.

Tableau 18 : Codes et versions utilisés au cours de la phase 2 d'intercomparaison du CR3

	ANTEA	**ENVIROS**	**INERIS**
Code *Hydrodynamique*	MARTHE *Version 6.3 (déc. 2002)*	TRANSIN *Version IV*	MODFLOW 2000 *Version GMS 5.0 (mai 2004)*
Schéma de résolution *Hydrodynamique*	Différences finies (DF)	Eléments finis (EF)	Différences finies (DF)
Code *Transport*	MARTHE *Version 6.3 (déc. 2002)*	TRANSIN *Version IV*	RT3D *Version GMS 5.0 (mai 2004)*
Schéma de résolution *Transport*	Différences finies (DF)	Eléments finis (EF)	Total Variation Diminishing (TVD)

Ces trois équipes ont participé aux deux phases de cette intercomparaison mais précisons que deux autres équipes sont également intervenues dans le cadre de l'étude du CR3, l'ENSMP pour la première phase et l'EGID pour la seconde.

Concernant les simulations réalisées avec BIOCHLOR, seuls les résultats du second modèle, BIOCHLOR 2, sont retenus pour cette comparaison (cf. justifications en fin de paragraphe 3.2.4).

Le tableau qui suit reprend les principales valeurs de calage considérées pour les paramètres liés à la biodégradation, la sorption et la source,. En effet, ces paramètres avaient été identifiés comme prépondérants suite à la première phase d'intercomparaison (Quiot, 2005).

Rappelons toutefois que le phénomène d'advection (ici paramètre de calage : perméabilité) est généralement prépondérant dans un modèle représentant une nappe alluviale, mais dans le cadre de ces intercomparaisons les modèles ont été fortement contraints en terme d'écoulement et la comparaison des paramètres associés à ce phénomène apparaît peu justifiée.

Tableau 19 : Comparaison des paramètres de calage retenus

	BIOCHLOR 2	NAS	ANTEA	ENVIROS	INERIS
αL (m)	11,6	13,45	30	15	20
αT (m)	1,2	0,67	3	3	4
K_d PCE (cm^3/g)	0,152	0,152	0,94	0,135	0,3
K_d TCE (cm^3/g)	0,039	0,039	0,65	0,01	0,1
K_d cis 1,2-DCE (cm^3/g)	0,025	0,013	0,29	0,095	0,07
λ PCE (an^{-1})	0,25	2,74	0,51	0,33	0,73
λ TCE (an^{-1})	12	5,55	16,88	36,17	0,91
λ cis 1,2-DCE (an^{-1})	2,5	9,53	2,53	5,89	0,18
[PCE] initiale (mg/L)	4	3			
[TCE] initiale (mg/L)	0,1	0,05			
[DCE] initiale (mg/L)	0,24	0,2			
Taux d'injection de PCE sur 5 ans (kg/j)			0,650	0,398	0,03

Ces résultats montrent notamment que les paramètres de dispersivité sont plus faibles avec les modèles analytiques qu'avec les outils numériques. Cette différence est sans doute la conséquence d'une zone source moins étendue dans le cas des modèles simplifiés et de l'absence de diffusion numérique. En effet, la représentation de la zone source peut être plus précise avec des modèles numériques (selon les informations disponibles).

Les valeurs de K_d (phénomène de sorption) pour le PCE et le TCE définies pour BIOCHLOR et NAS appartiennent au domaine de variation précédemment obtenu avec les outils numériques.

Dans le cas du DCE, les valeurs considérées avec BIOCHLOR et NAS sont plus faibles que celles des modèles numériques mais la conséquence sur les concentrations calculées est sans doute négligeable (d'autant plus pour BIOCHLOR qui utilise un coefficient de retard unique pour toutes les substances).

Les constantes de biodégradation obtenues par NAS (calcul automatique) sont très éloignées des autres valeurs, en particulier pour le PCE et le DCE. Cette observation repose le problème mis en évidence précédemment quant au calcul automatique de certains paramètres par le logiciel NAS.

Dans le cas de BIOCHLOR, les valeurs des constantes de dégradation appartiennent au domaine de variation précédemment établi (si ce n'est le 0,25 an^{-1} pour le PCE).

Pour le terme source, les valeurs obtenues avec les modèles analytiques sont similaires ce qui n'était pas le cas pour les modèles numériques où de fortes variations étaient observées pour le taux d'injection (de 0,03 à 0,65 kg/j).

Les 3 figures qui suivent présentent les concentrations en PCE, TCE et DCE calculées par les différents modèles à 5 ans de simulation au niveau de 6 ouvrages de surveillance (de la zone source vers l'aval hydraulique).

Comme annoncé précédemment (§ 3.2.5) les valeurs de BIOCHLOR ont été déterminées via l'analyse des graphiques disponibles en fin de simulation.

Rappelons que cette date de simulation (5 ans) correspond à la date de calage précisée dans le cahier des charges.

Si ce n'est en S-5 (zone source), les concentrations calculées par les modèles simples appartiennent aux domaines de variation définis par les résultats de la précédente phase d'intercomparaison (via modèles numériques).

Les résultats obtenus en aval, au droit d'un ouvrage à enjeu tel que PL, sont très proches de la mesure.

Ainsi, dans le cas du CR3, avec les données d'entrée disponibles, des outils plus simples sont capables de simuler une situation de manière aussi précise que le font les outils numériques. Cette similarité des résultats peut cependant être expliquée par le fait que l'exercice d'intercomparaison mené avec les outils numériques ait été fortement simplifié. En effet, pour ce qui concerne les écoulements, la représentation de la source, etc des hypothèses simplificatrices ont été considérées.

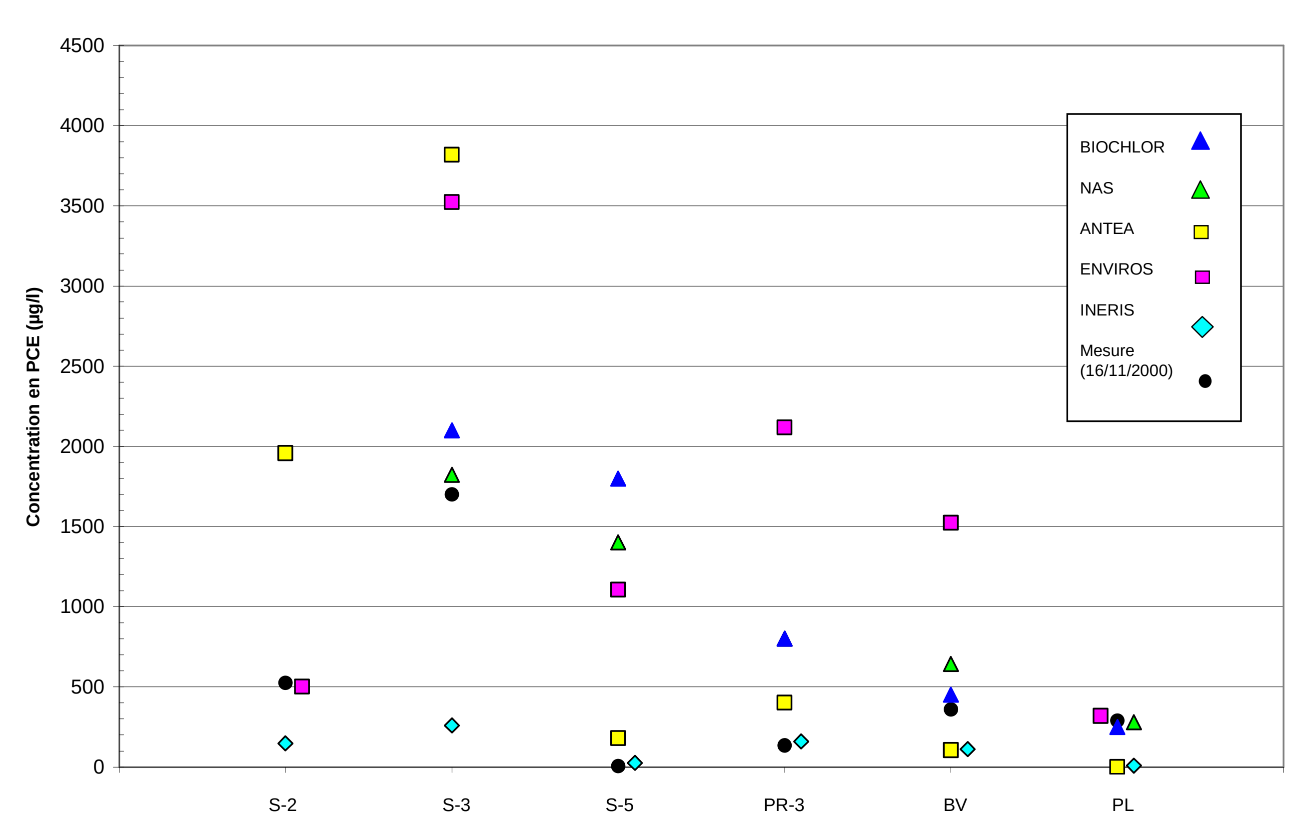


Figure 17 : Comparaison du calage des concentrations en PCE sur 6 piézomètres répartis d'amont vers l'aval

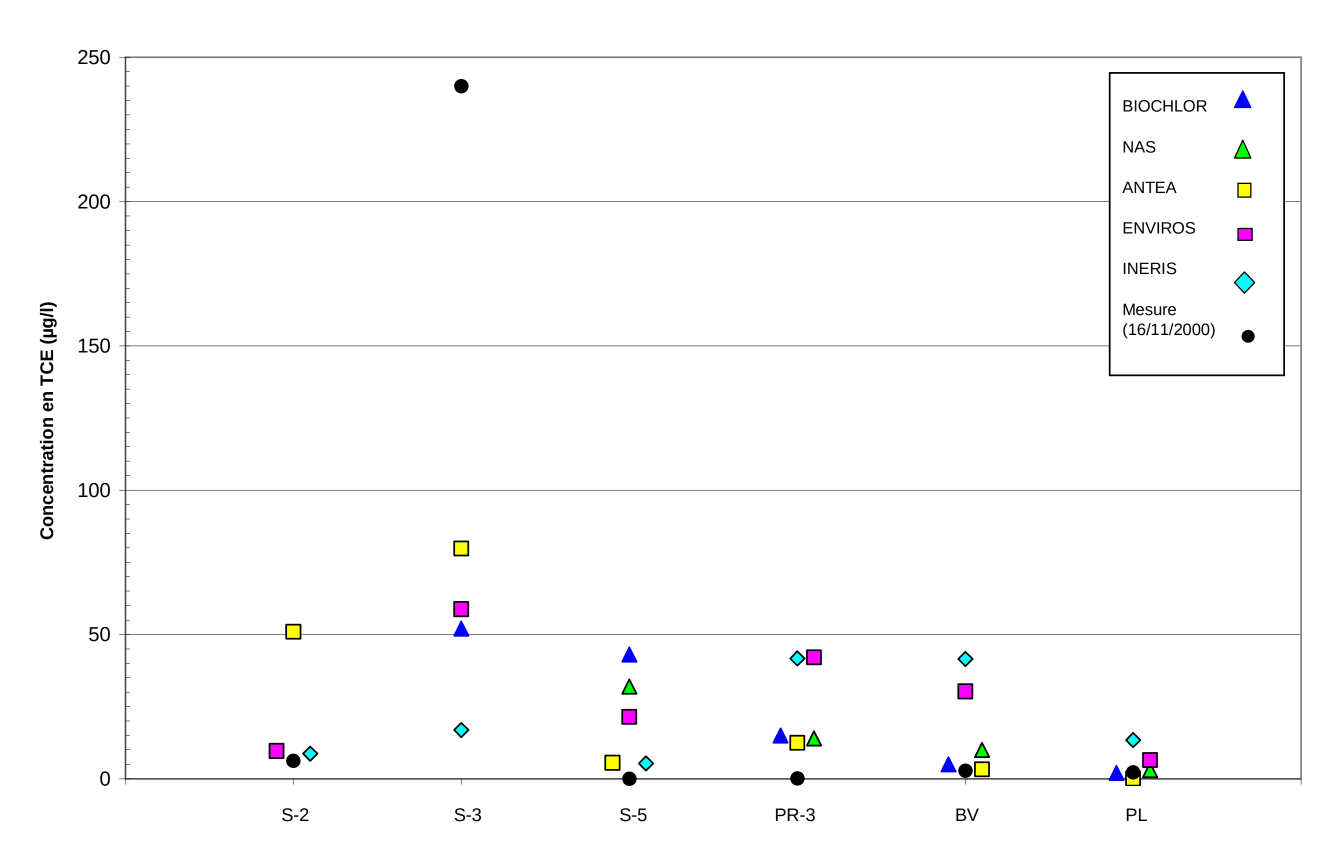


Figure 18 : Comparaison du calage des concentrations en TCE sur 6 piézomètres répartis d'amont vers l'aval

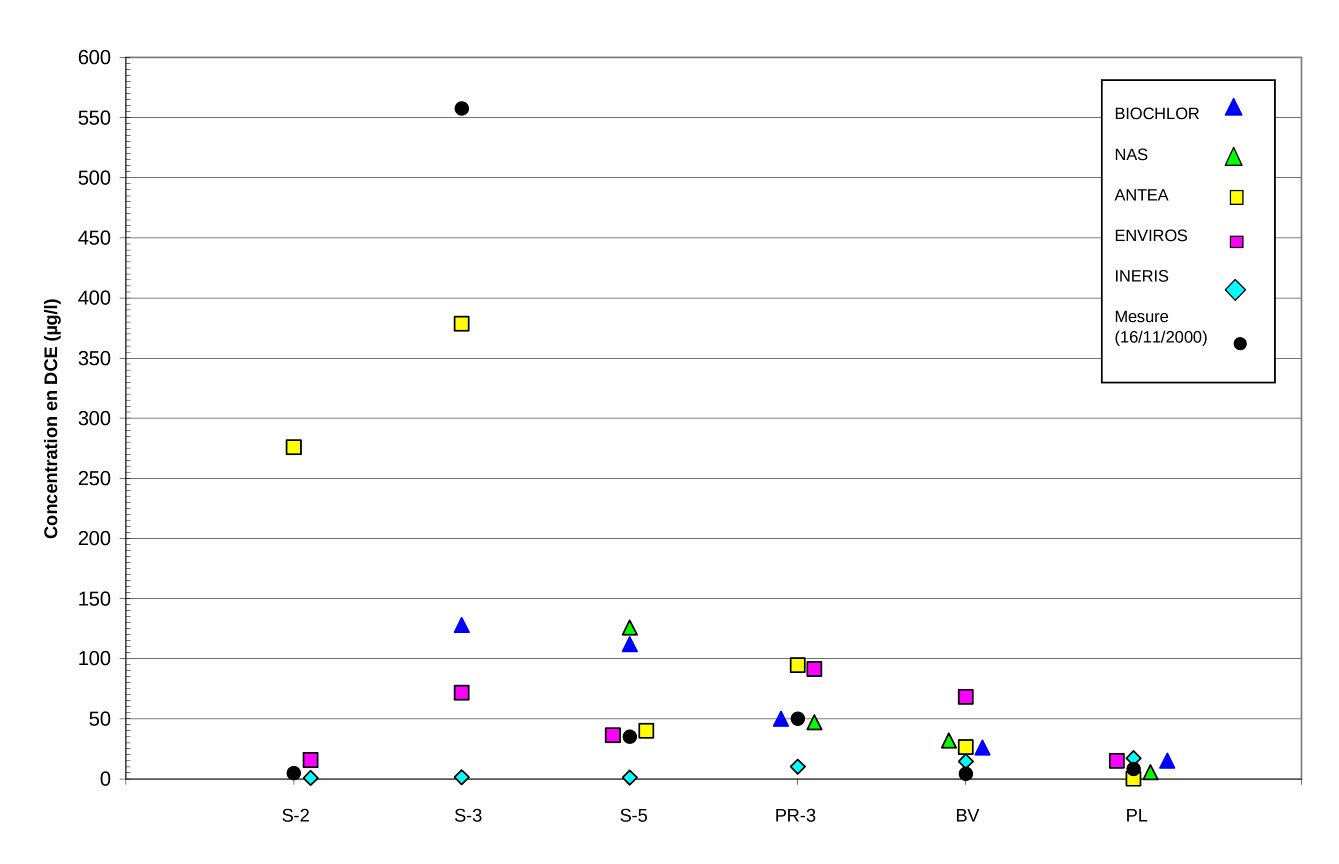


Figure 19 : Comparaison du calage des concentrations en DCE sur 6 piézomètres répartis d'amont vers l'aval

<u>Remarque :</u>

Les résultats prédictifs ne sont pas comparés dans le cadre de cet essai car NAS ne permet pas de réaliser ce type de simulation et les concentrations calculées par les outils numériques sont très faibles à 10 ans de simulation.

4. SYNTHESE ET RECOMMANDATIONS RELATIVES AU CHOIX D'UN OUTIL DE CALCUL

Les paragraphes qui précédent ont montré que le choix d'un outil adapté pouvait être basé sur les considérations suivantes :

- les phénomènes considérés ;
- les objectifs du modèle ;
- les outils disponibles et l'adaptation de l'outil envisagé au cas traité.

Les éléments présentés ci-dessous, liés à ces considérations, permettront d'orienter le modélisateur dans le choix d'un modèle adapté au site étudié. Précisons cependant que les points abordés ne sont pas exhaustifs et selon le cas étudié d'autres informations pourront guider le modélisateur.

- Phénomènes considérés

Suite à la réalisation d'un schéma conceptuel il est nécessaire de définir les phénomènes qui seront considérés par le modèle, en fonction de l'échelle choisie, des données disponibles…

Certains phénomènes sont pris en compte par l'ensemble des outils (notamment l'advection) mais d'autres comme la biodégradation ou la volatilisation ne sont pas toujours disponibles ou sont simulés de façons totalement différentes. Par exemple, pour ce qui concerne les cinétiques de biodégradation (sous forme dissoute), le modèle peut permettre de considérer une cinétique de dégradation d'ordre 0, d'ordre 1 et/ou une cinétique de Monod.

De plus, dans le cas d'une « première » étude (conservatoire), de nombreuses simplifications seront apportées (si peu de données existent la ZNS ne sera pas représentée, l'injection de polluant se fera directement en ZS…). Ainsi, l'emploi d'un modèle simplifié peut être justifié (modèle analytique en première approche). Citons également les conditions d'échanges nappe/rivière qui pourront orienter le modélisateur dans son choix d'outil adapté (bien que peu de modèles permettent actuellement de simuler efficacement et facilement ces échanges).

Cependant, la complexité du système à modéliser (conditions aux limites, source…) est une information essentielle. Lorsque les propriétés du milieu varient fortement dans l'espace (hétérogénéités), que la géométrie et la grandeur du terme source sont complexes, un modèle numérique permettra de modéliser le site plus efficacement qu'une solution analytique (dans le cas où les données indispensables sont disponibles). Par exemple, lorsque le régime hydraulique pseudo-permanent ne peut suffire à reproduire les fortes variations observées en terme de concentrations, il peut être nécessaire d'utiliser un modèle numérique pour simuler le régime transitoire.

En fonction du type de polluant considéré et de sa toxicité le choix peut aussi varier. En présence de chloroéthènes un modèle simulant la biodégradation du PCE et sa transformation en CV est souvent indispensable du fait de la toxicité de cette dernière substance. En effet, la simulation aboutissant à une courbe enveloppe sans considérer la biodégradation (ni la sorption) peut entraîner des simplifications trop importantes en terme de risque pour la santé.

- Objectifs du modèle

Les objectifs qui sont fixés au modélisateur doivent également être considérés. Comme vu précédemment, NAS ne permet pas de réaliser des simulations prédictives au droit de points de surveillance situés en aval hydraulique, il ne pourrait donc pas être utilisé si l'objectif du modèle était de prédire l'évolution des concentrations au niveau d'un AEP en aval.

L'enjeu que représentent les résultats attendus du point de vue de la sécurité des personnes (de leur santé) doit également intervenir dans ce choix.

Enfin, il est nécessaire de prendre en considération les moyens financiers mis à disposition du prestataire et le temps imparti pour rendre ses conclusions (l'achat du logiciel est-il possible ? de nouvelles investigations pourront-elles être conduites ? plusieurs chroniques piézomètriques seront-elles disponibles ?…).

- Outils disponibles et adaptation au cas traité

La difficulté d'utilisation et la maîtrise de l'outil apparaissent également importante. Pour les appréhender, le retour d'expérience personnel, de collègues ou l'analyse des publications scientifiques peuvent être utiles.

Le temps de calcul est également à prendre en compte selon le délai dont le modélisateur dispose pour rendre ses conclusions. En effet, les modélisations numériques avec des modèles complexes peuvent durer plusieurs heures (modèle multicouche avec de nombreuses hétérogénéités, de la biodégradation et de la sorption voire de la géochimie).

La quantité et la qualité des données disponibles sont aussi très importantes. Dans le cas où peu de données sont disponibles, il n'est pas judicieux d'employer un modèle complexe tenant compte de tous les phénomènes, de la ZNS… L'incertitude quant aux résultats serait trop importante.

Au vu de ce qui précède, il apparaît que de nombreux arguments peuvent être avancés pour justifier le choix d'un outil de modélisation par rapport à un autre et que chaque cas est différent.

Le tableau ci-dessous résume les recommandations présentées.

Tableau 20 : Informations à considérer pour le choix d'un outil de modélisation adapté

Phénomènes	Objectifs	Outils
Prise en compte des phénomènes identifiés et retenus	Les calculs doivent permettre de répondre aux attentes	Facilité d'utilisation
Complexité du site et hypothèses simplificatrices	Enjeux en terme de santé publique	Retour d'expérience (personnel, extérieur)
Nature et toxicité des polluants à considérer	Coût et délai	Quantité et qualité des données

Pour conclure, un modèle analytique pourra être privilégié en première approche (exploratoire) sur un site avec peu de données. Ces outils sont généralement faciles à utiliser et rapides à mettre en œuvre. Néanmoins, les résultats obtenus ne valent que pour un site homogène, isotrope, un régime d'écoulement permanent… cas peu répandu dans la nature.

A contrario le modèle numérique requiert de nombreuses données d'entrée mais dans le cas de sites complexes, avec de nombreuses hétérogénéités, des variations de conditions aux limites dans l'espace et le temps… il permettra d'aboutir à des résultats plus cohérents vis à vis des conditions naturelles.

En définitive, concernant le choix d'un outil de modélisation, la démarche recommandée consiste à privilégier une approche pragmatique[9] en mettant en avant et en justifiant les réserves relatives aux résultats présentés. Il convient, si possible, de débuter par un modèle simple (analytique ou numérique mais avec de nombreuses hypothèses simplificatrices) avant de compliquer le modèle si nécessaire. Mais en cas de trop fortes incertitudes, le modèle doit conduire à recommander de nouvelles investigations.

Outre le suivi de la démarche générale proposée au paragraphe 1.4, au cours de toute modélisation, il est également recommandé de contraindre les paramètres de calage par des données de terrain (obtenues via un état de l'art et le respect des normes en vigueur) et de les privilégier par rapport aux données bibliographiques (sauf si leur qualité peut être remise en cause).

[9] Le mieux possible avec ce dont on dispose.

CONCLUSION

Ce document est destiné aux personnes impliquées dans la mise en œuvre de modélisations relatives au transfert de polluants dans les sols et les eaux souterraines. Son objectif est d'apporter une aide au modélisateur notamment dans le choix d'un outil adapté et proportionné à l'étude engagée.

Pour cela, il reprend tout d'abord des aspects généraux liés à la modélisation, en particulier la démarche générale. Par la suite, une présentation d'un certain nombre d'outils de calcul disponibles actuellement met en exergue leur diversité et la difficulté de choisir l'outil le plus adapté.

Le test de deux d'entre eux, BIOCHLOR et NAS, et la comparaison des résultats acquis dans le cadre de la simulation d'un cas traité précédemment (Cas Réel n°3 de TRANSPOL) par des outils numériques apporte des indications complémentaires quant aux éléments justifiant ou non le choix d'un modèle.

Des recommandations sont ainsi formulées et portent principalement sur le choix des phénomènes à considérer, les objectifs attendus et les outils de calcul en eux-mêmes. Cependant, la clef de l'efficacité et de la précision lors de la modélisation d'un système dépend en premier lieu de l'élaboration du modèle conceptuel et de la qualité des données disponibles et utilisées.

Au vu des informations présentées dans ce document, il apparaît que les modèles analytiques nécessitent que les paramètres et les limites du système soient fortement contraints. Or l'hétérogénéité est inhérente à tous les systèmes hydrogéologiques et joue un rôle prépondérant dans les écoulements et le transport de masse. Le modèle analytique est donc souvent utilisé en première approche afin de développer une démarche dite conservatoire ou sécuritaire.

Concernant ce dernier point, il convient de préciser que de récents travaux semblent mettre en doute le fait que les outils analytiques aient toujours une approche sécuritaire. En effet, au cours d'une récente intervention (octobre 2007) où les résultats d'une intercomparaison menée entre BIOSCREEN, AT123D et MODFLOW/MT3D étaient présentés, ses auteurs ont mis en doute le caractère sécuritaire de BIOSCREEN (mis en avant par ses développeurs). BIOSCREEN serait moins conservatif que MODFLOW/MT3D et surtout que AT123D pourtant basé lui aussi sur la solution de Domenico (Schneiker et Cecan, 2007). Ces résultats n'ont pas pu être vérifiés, il convient donc de rester prudent, mais le fait de mentionner ces travaux permet de mettre en garde l'utilisateur vis à vis d'excès de confiance quant aux résultats « sécuritaires » obtenus par un modèle analytique.

Un modèle numérique requiert de nombreuses données d'entrée mais dans le cas de sites complexes, avec de nombreuses hétérogénéités, des variations de conditions aux limites dans l'espace et le temps… il permettra d'aboutir à des résultats plus cohérents vis à vis des conditions naturelles.

La démarche recommandée consiste donc à privilégier une approche pragmatique en mettant en avant et en justifiant les réserves relatives aux résultats présentés. Il convient si possible de débuter par un modèle simple (analytique ou numérique mais avec de nombreuses hypothèses simplificatrices) avant de compliquer le modèle si nécessaire et en fonction des informations disponibles. En cas de trop fortes incertitudes les conclusions de la modélisation doivent recommander de nouvelles investigations.

REFERENCES

Aziz, C.E. ; Newell, C.J. ; Gonzales, J.R., Haas, P.E. ; Clement, T.P. ; Sun, Y. (2000). BIOCHLOR Natural Attenuation Decision Support System, User's Manual Version 1.0, U.S. EPA, Office of Research and Development, EPA/600/R-00/008, Washington D.C.

Carey, G.R. ; Van Geel, P.J. ; Murphy, J.R. (1999). BioRedox-MT3DMS V2.0 : A Coupled Biodegradation-Redox Model for Simulating Natural and Enhanced Bioremediation of Organic Pollutants—User's Guide. , Conestoga-Rovers and Associates, Waterloo, Ontario, Canada.

Castany, G. (1982). Hydrogéologie – Principes et méthodes, Editions Dunod.

Claret, F. ; Tournassat, C. ; Guyonnet, D. ; Crouzet, C. ; C. Gaucher, E. (2007). Importance de la spéciation géochimique pour l'atténuation des pollutions métalliques. Environnement et Technique, n°269.

Clement, T. P. (2001), Generalized solution to multispecies transport equations coupled with a first-order reaction network, Water Resour. Res., 37(1), 157–164.

Côme, J.M. ; Quintard, M. ; Schäfer, G., Mosé, R. ; Delaplace, P. ; Haeseler, F. (2006). Modélisation du devenir des composés organo-chlorés aliphatiques dans les aquifères, Guide méthodologique ADEME, Programme R&D MACAOH (Modélisation, Atténuation, caractérisation dans les aquifères des Organo-Halogénés).

De Marsily, G. (1994). Hydrogéologie quantitative. Cours de l'Ecole des mines de Paris.

De Marsily, G. (1981). Quantitative hydrogeology. Groundwater hydrology for engineers. Masson Eds., Academic Press. Paris.

Domenico, P.A. (1987). An analytical model for multidimensional transport of a decaying contaminant species. Journal of Hydrology, 91, 49-58.

Domenico, P.A. ; Robbins, G. A. (1985). A new method of contaminant plume analysis. Ground Water,23 (4), 476-485.

EPA, State of Ohio - Division Drinking and Ground Waters. (2007). Ground Water Flow and Fate and Transport Modeling. Technical Manual for Ground Water Investigations, Chapter 14.

Essaid, H.I. ; Bekins, B.A. (1997). BIOMOC, A multispecies solute-transport model with biodegradation: U.S. Geological Survey Water-Resources Investigations Report 97-4022.

Guarnaccia, J. ; Pinder, G. ; Fishman, M. ; Kerr, R. (1997). US EPA, EPA/600/R-97/102, NAPL-Simulator.

Guyonnet, D. ;Neville, C. (2004). Dimensionless analysis of two analytical solutions for 3-D solute transport in groundwater. Journal of Contaminant Hydrology, 75, 141-153.

Konikow, L.F. ; Goode, D.J. ; Hornberger, G.Z. (1996). A Three- Dimensional Method-of-Characteristics Solute-Transport Model (MOC3D): U.S. Geological Survey Water-Resources Investigations Report 96-4267.

Lemière, B. ; Seguin, J.J. ; Le Guern, C. ; Guyonnet, D. ; Baranger, Ph. (2001) - Guide sur le comportement des polluants dans les sols et les nappes - BRGM.

McCarthy, P. L. ; Reinhard, M. ; Rittman, B. E. (1981). Trace organics in groundwater. Environmental Science and technology, 15 (1), 40-51.

Martin-Hayden, J. ; Robbins, G.A. (1997). Plume distortion and apparent attenuation due to concentration averaging in monitoring wells. Ground Water, 35 (2), 339-346.

MDH (2005). Evaluation of Computer Models for Predicting the Fate and Transport of Salt in Soil and Groundwater.

Mulligan, C.N. ; Yong, R.N. (2004). Natural attenuation of contaminated soils. Environment International 30, 587-601.

Newell, C.J. ; Smith, A.P. ; Aziz, C.E. ; Khan, TA ; Gonzales, J.R. (1998). BIOCHLOR: A Planning-Level Natural Attenuation Model and Database for Solvent Sites, in First International Conference on Remediation of Chlorinated and Recalcitrant Compounds, G. B. Wickramanayake and R. E. Hinchee, Monterey, California, Battelle Press. Natural Attenuation, Chlorinated and Recalcitrant Compounds: pp. 237-242.

Nex, F. (2004). Modélisation numérique de la biodégradation des composés organo-chlorés dans les aquifères fondée sur des expérimentations in situ – le cas des chloroéthènes. Thèse de doctorat de l'Université Louis Pasteur, Strasbourg.

Pauls, R. ; Karvonen, A.D. ; Reeves, M. (2003) Evaluation of Computer Models for Predicting the Fate and Transport of Salt in Soil and Groundwater, Phase II, Alberta Environment, A355-1000002,.

Pauls, R. ; Karvonen, A.D. ; Reeves, M. (2002) Evaluation of Computer Models for Predicting the Fate and Transport of Salt in Soil and Groundwater, Phase I, Alberta Environment, A355-1000002.

Quezada, C.R. ; Hansen, C.M. ; Clement, T.P. ; Jones, N.L. ; Lee, K.K. (2003). ART3D- An analytical model for predicting 3-dimensional reactive transport, Accepted, Proceeding of the MODFLOW and more 2003 : Understanding through modeling, Sept 17-19th 2003, Golden, Colorado.

Quiot, F. (2006). TRANSPOL – Cas Réel n°3 – Phase 2 . Modélisation de l'impact d'un déversement de composés chlorés sur la qualité des eaux souterraines – Intercomparaison des résultats. Rapport INERIS-DRC-06-75927/DESP-R03a.

Quiot, F. (2005). TRANSPOL – Cas Réel n°3. Pollutio n d'une nappe alluviale par des solvants chlorés – Intercomparaison des résultats. Rapport INERIS-DRC-05-66248/DESP-R01a.

Quiot, F. (2004). Modélisation de l'impact d'un déversement de composés chlorés sur la qualité des eaux souterraines. TRANSPOL – Cas Réel n°3. Rapport INERIS-DRC-04-55503/DESP-R01a.

Rafaï, H. ; Wilson, J. T. ; Newell, C. J. ; Kennedy, L. G. ; Gonzales, J. R. ; Dendrou, S. ; Dendrou, B. (1998). BIOPLUME III: Natural Attenuation Decision Support System. Version 1.0. User's Manual (EPA/600/R-98/010).

Rollin, C. ; Quiot, F. (2006). Eléments traces métalliques. Guide méthodologique. Recommandations pour la modélisation des transferts des éléments traces métalliques dans les sols et les eaux souterraines. Rapport INERIS-DRC-06-66246/DESP-R01a.

Rollin, C. ; Quiot, F. (2006). TRANSPOL – Cas Réel n°3 – CdC n°3. Cahier des charges pour la réalisation de nouvelles simulations suite à des investigations supplémentaires in situ et en laboratoire. Rapport INERIS-DRC-06-75927/DESP-R01a.

Rollin, C. ; Quiot, F. (2005). Hydrocarbures Aromatiques Polycycliques - Guide méthodologique - Acquisition des données d'entrée des modèles analytiques ou numériques de transferts dans les sols et les eaux souterraines, INERIS–DRC–66244/DESP–R01.

Rollin, C. (2003). TRANSPOL II Cahier des charges pour la réalisation d'un modèle numérique (CdC n°2). Cas réel n°3 : impact d 'un déversement de composés chlorés sur la qualité des eaux souterraines - INERIS-DRC-03-46524/DESP-R01.

Rollin, C. ; Bour, O. (2002). TRANSPOL II Cahier des charges pour la réalisation d'un modèle numérique (CdC n°1). Cas réel n°3 : imp act d'un déversement de composés chlorés sur la qualité des eaux souterraines – INERIS-DRC-02-25294/DESP-R18.

Saada, A. ; Nowak, C. ; Chartier, R. et Coquereau, N. (2006). Etat des connaissances sur l'atténuation naturelle des hydrocarbures – Rapport final. Rapport BRGM/RP-54183-FR.

Schneiker, RA ; Cecan, L. (2007). BIOSCREEN, AT123D, and MODFLOW/MT3D, a Comprehensive Review of Model Results in the Annual International Conference on Soil, Sediments and Water, University of Massachusetts Amherst. October 15-18, 2007.

Simunek, J. ; Sejna, M. ; van Genuchten, M.T. (2007). The HYDRUS Software Package for Simulating Two- and Three-Dimensional Movement of Water, Heat, and Multiple Solutes in Variably-Saturated Media, User Manual, Version 1.0, PC Progress, Prague, Czech Republic.

Simunek, J. ; van Genuchten, M.T. (1994). The CHAIN_2D Code for Simulating Two-Dimensional Movement of Water, Heat, and Multiple Solutes in Variably-Saturated Porous Media, Version 1.1. Research Report No. 136, U. S. Salinity Laboratory, USDA, ARS, Riverside, California.

Srinivasan, V. ; Clement, T.P. ; Lee, K.K. (2007). Domenico solution--is it valid?. Ground Water,45(2), 136-146.

Srinivasan, P. ; Mercer, J.W. (1988). Simulation of biodegradation and sorption processes in groundwater, Ground Water, 26(4):475-487.

West, M.R. ; Kueper, B.H. ; Ungs, M.J. (2007). On the use and error of approximation in the Domenico (1987) solution. Ground Water, 45(2), 126-135.

Wexler, E.J. (1992a). Analytical solutions for one-, two-, and three-dimensional solute transport in ground-water systems with uniform flow: U.S. Geological Survey Techniques of Water-Resources Investigations, book 3, chap. B7.

Wexler, E.J. (1992b). Analytical solutions for one-, two-, and three-dimensional solute transport in ground-water systems with uniform flow -- Supplemental Report: Source codes for computer programs and sample data sets: U.S. Geological Survey Open-File Report 92-78.

Wiedemeier, T.H. ; Swanson, M.A. ; Moutoux, D.E. ; Gordon, E.K. ; Wilson, J.T. ; Wilson, B.H. ; Kampbell, D.H. ; Haas, P.E. ; Miller, R.N. ; Hansen, J.E. ; Chapelle F.H. (1998) - Technical protocol for evaluating natural atténuation of chlorinated solvents in groundwater - EPA/600/R-98/128.

Yeh, G.T. (1993). AT123D, version 1.22. Oak Ridge National Laboratories, Oak Ridge Tennessee. Distributed by Pennsylvania State University, University Park, Pennsylvania

Yeh G.T., Sharp-Hansen, S. ; Lester, B. ; Strobl,R. ; Scarbrough, J. (1992): 3DFEMWATER/3DLEWASTE : numerical codes for delineating wellhead protection areas in agricultural regions based on the assimilative capacity criterion. Office of Research and Development, Environmental Protection Agency, Athens, GA. EPA/600/R-92/223.

LISTE DES ANNEXES

Repère	Désignation	Nb pages
A	Principales caractéristiques d'un échantillon d'outils de calculs utilisés dans le cadre de la simulation du transfert de polluants dans les sols et les eaux souterraines	3 A3
B	Exemples de travaux d'application relatifs à l'utilisation de codes de calculs utilisés dans le cadre de la simulation du transfert de polluants dans les sols et les eaux souterraines	2 A4

ANNEXE A

PRINCIPALES CARACTERISTIQUES D’UN ECHANTILLON D’OUTILS DE CALCULS UTILISES DANS LE CADRE DE LA SIMULATION DU TRANSFERT DE POLLUANTS DANS LES SOLS ET LES EAUX SOUTERRAINES

	Description générale	Convection	Dispersion	Diffusion	Sorption	Dégradation	Autre précision	Source	Acquisition	Référence/dernière version disponible
ANALGWST-PATCHF	ANALGWST - Modèle analytique, (PATCHF - simule le transport en 3D)	Oui	Oui	Non	Non	Oui dégradation séquentielle du 1er ordre		Constante	Gratuit http://water.usgs.gov/software/analgwst.html	Wexler, 1992 (USGS) Version 1.1 - 1996
ART3D	Modèle analytique, 3D, calage inverse disponible	Oui	Oui	Non	Oui Sorption linéaire, un coefficient de retard pour toutes les substances	Oui dégradation séquentielle du 1er ordre		Constante ou décroissante	Gratuit http://www.et.byu.edu/~njones/share/art3d/	Clement, 2001 Quezada *et al.*, 2003 Version 1.0 beta - 2001
AT123D	Modèle analytique, 1D, 2D et 3D	Oui	Oui	Non	Oui	Oui dégradation séquentielle du 1er ordre	Possibilité de couplage avec SESOIL	Différentes options liées à sa géométrie (point, ligne…) et à l'entrée de polluants dans l'aquifère (constante, décroissante…) sont disponibles	Payant	Yeh, 1981 Version 1.22 - Juin 1993
BIO 1D	Modèle analytique, transport réactif (aérobie, anaérobie avec ou sans sorption) en 1D Notamment utilisé pour exploiter les résultats d'essais en colonne	Oui	Oui	Non	Oui	Oui dégradation du 1er ordre pour deux substances, dégradation aérobie avec Monod modifié, dégradation anaérobie avec Michaelis-Menten			Payant	Srinivasan, Mercer (1988)
BIOCHLOR	Modèle analytique (spreadsheet), permet de simuler en 2D et 3D le transfert de polluants chlorés + atténuation naturelle Déchlororation réductrice des chloroéthènes et chloroéthanes	Oui	Oui	Non	Oui	Oui dégradation séquentielle du 1er ordre	Deux zones de dégradation différentes peuvent être considérées Bilan de masse	Constante ou décroissante	Gratuit http://www.epa.gov/ada/csmos/models/biochlor.html	Aziz *et al.*, 2000 (US EPA), Newell *et al.*, 1998 Version 2.2 - Mars 2002
BIOMOC	Modèle numérique, 2D, transport et dégradation de plusieurs substances	Oui	Oui	Non	Oui	Oui Nombreuses options disponibles (accepteurs d'électrons, dégradation séquentielle, cinétiques de Monod…)			Gratuit http://water.usgs.gov/software/BIOMOC/	Essaid, Bekins 1997 (USGS) Version 1.0 - Mars 1999

	Description générale	Convection	Dispersion	Diffusion	Sorption	Dégradation	Autre précision	Source	Acquisition	Référence/dernière version disponible
BIOPLUME III	Modèle numérique, 2D, transfert de polluants de type hydrocarbures (BTEX) + atténuation naturelle	Oui	Oui	Non	Oui	Oui Biodégradation aérobie ou anaérobie (dégradation du 1er ordre, cinétiques Monod…)	Plusieurs accepteurs d'électrons : O2, NO3, Fe(III), SO4, CO2	Variable	Gratuit http://www.epa.gov/ada/csmos/models/bioplume3.html	Rafaï *et al.*, 1998 Version 1.0 - Septembre 1997
BIOREDOX (BioRedox-MT3DMS)	Modèle numérique, BioRedox-MT3DMS (BioRedox), 3D, transfert des hydrocarbures (BTEX)	Oui	Oui	Oui	Oui	Oui accepteurs d'électrons, dégradation séquentielle instantanée et du premier ordre			Gratuit http://http-server.carleton.ca/~pvangeel/research/bioredox/bioredox.htm	Carey *et al.*, 1999
BIOSCREEN	Modèle analytique (spreadsheet), 2D, 3D, transfert de polluants de type hydrocarbures (BTEX) + atténuation naturelle	Oui	Oui	Non	Oui Sorption linéaire, un coefficient de retard pour toutes les substances	Oui dégradation séquentielle du 1er ordre	Dégradation aérobie et anaérobie Bilan de masse	Constante ou décroissante	Gratuit http://www.epa.gov/ada/csmos/models/bioscrn.html	Developed by Newell *et al.* (1996) for AFCEE Version 1.4 - Juillet 1997
CHAIN 2D	Modèle numérique, 2D, applicable en ZS et ZNS pour le transfert de polluants et de chaleur	Oui	Oui	Oui	Oui	Oui dégradation séquentielle du 1er ordre	Considère l'équilibre entre phases		Demande : USDA-ARS U.S. Salinity Laboratory 450 West Big Springs Road Riverside, CA 92507-4617	Simunek, Th. van Genuchten, 1994
FEFLOW	Modèle numérique, 2D, 3D, applicable en ZS et ZNS pour le transfert de polluants et de chaleur	Oui	Oui	Oui	Oui	Oui dégradation séquentielle du 1er ordre	Considère les différences de densité (biseau salé)	Variable	Payant	Version 5.3 - 2006 http://www.wasy.de/english/produkte/feflow/doku.html
FEMWATER	Modèle numérique, 2D, 3D, applicable en ZS et ZNS pour le transfert de polluants et de chaleur Couplage de 3DFEMWATER (écoulement) et 3DLEWASTE (transport)	Oui	Oui	Oui	Oui	Oui dégradation séquentielle du 1er ordre	Considère les différences de densité (biseau salé)	Variable	Payant	Yeh *et al.*, 1992

	Description générale	Convection	Dispersion	Diffusion	Sorption	Dégradation	Autre précision	Source	Acquisition	Référence/dernière version disponible
HYDRUS 1D	Modèle numérique, 1D, transfert de polluants et de chaleur (il existe HYDRUS 2D et 3D)	Oui	Oui	Oui	Oui	Oui dégradation séquentielle du 1er ordre		Constante ou décroissante	Gratuit http://www.pc-progress.cz/Pg_Hydrus_1D.htm	Version 3.00 - 2005
MOC3D	Modèle numérique, 3D, transport d'une substance dissoute, couplé à MODFLOW pour les écoulements	Oui	Oui	Oui	Oui	Oui			Gratuit http://water.usgs.gov/nrp/gwsoftware/moc3d/moc3d.html	Konikow *et al.*, 1996 Version 3.01 - Juillet 1999
MODFLOW-SURFACT	Modèle numérique, 2D, 3D, basé sur MODFLOW	Oui	Oui	Oui	Oui	Oui dégradation séquentielle du 1er ordre	Considère la volatilisation	Variable	Payant	Version 2.2
NAPL	Modèle numérique, 2D, 3D, transfert en ZS et ZNS de LPNA (DNAPL en anglais)	Oui	Oui	Oui	Oui	Non			Gratuit http://www.epa.gov/ada/csmos/models/napl.html	Guarnaccia *et al.*, 1997 Version 1.0 - Octobre 1997
NAS	Modèle couplé analytique/numérique (spreadsheet), permet de déterminer les objectifs d'un traitement de la source, le temps de stabilisation du panache… Couplé à SEAM3D (modèle numérique) pour la partie transport	Oui	Oui	Non	Oui	Oui dégradation séquentielle du 1er ordre	Différents paramètres sont calculés directement	Constante	Gratuit http://www.nas.cee.vt.edu/index.php	Version 2.2 - Février 2006
PHT3D	Modèle numérique de transport réactif, 2D, 3D, couplage de MT3DMS et du modèle géochimique PHREEQC-2	Oui	Oui	Oui	Oui	Oui		Variable	Gratuit http://www.pht3d.org/	Version 1.46

ANNEXE B

EXEMPLES DE TRAVAUX D'APPLICATION RELATIFS A L'UTILISATION DE CODES DE CALCULS UTILISES DANS LE CADRE DE LA SIMULATION DU TRANSFERT DE POLLUANTS DANS LES SOLS ET LES EAUX SOUTERRAINES

ART3D

Jones, N.L. ; Clement, T.P. ; Hansen, C.M. (2006). A three-dimensional analytical tool for modeling reactive transport. Ground Water. Volume 44, 4, 613-617.

BIO 1D

Maraqa, M.A. ; Munjed, A. (2007). Retardation of nonlinearly sorbed solutes in porous media. J ENVIRON ENG-ASCE 133, 12, 1080-1087.

BIOCHLOR

Clement, T.P. ; Truex, M.J. ; Lee, P. (2002) A case study for demonstrating the application of U.S. EPA's monitored natural attenuation screening protocol at a hazardous waste site. Journal of Contaminant Hydrology, 59, 1-2, 133-162.

BIOPLUME III

Suarez, M.P. ; Rifaï, H.S. (2004). Modeling natural attenuation of total BTEX and benzene plumes with different kinetics. GROUND WATER MONIT R 24, 3, 53-68.

BIOREDOX

Schreiber, M.E. ; Carey, G.R. ; Feinstein, D.T. (2004). Mechanisms of electron acceptor utilization: implications for simulating anaerobic biodegradation. J CONTAM HYDROL 73, 1-4, 99-127.

HYDRUS 1D

Simunek, J. ; Jacques, D. (2006). Multicomponent geochemical transport modeling using HYDRUS-1D and HP1. J AM WATER RESOUR AS 42, 6, 1537-1547.

MODFLOW et RT3D

Clement, T. P., Johnson, C. D., Sun, Y. W., Klecka, G. M., and Bartlett, C. (2000). Natural attenuation of chlorinated ethene compounds: model development and field-scale application at the Dover site. Journal of Contaminant Hydrology, 42, 2-4, 113-140.

MODFLOW SURFACT

Kim, J.W., Kim, J. ; Choi, H. (2004). Modeling the fate and transport of organic and nitrogen species in soil aquifer treatment process. WATER SCI TECHNOL 50, 2, 255-261.

NAS

Mendez, E. ; Widdowson, M.A. ; Brauner, J.S. ; Chapelle, F. ; Casey, C. (2004). Natural Attenuation Software (NAS): A computer program for estimating remediation times of contaminated groundwater, In: G. Latini, G. Passerini, and C. Brebbia (Eds.), Development and Application of Computer Techniques to Environmental Studies X (ENVIROSOFT 2004), ISBN: 1-85312-718-3, 185-194.

Chapelle, F.H. ; Widdowson, M.A. ; Brauner, J.S. ; Mendez, E. ; Casey, C. (2003). Methodology for estimating times of remediation associated with monitored natural attenuation: U.S. Geological Survey Water-Resources Investigations Report 03-4057, 2003.

UTCHEM

Schaerlaekens, J. ; Mertens, J. ; Linden, J.V. ; Vermeiren, G. ; Carmeliet, J. ; Feyen, J. (2006). A multi-objective optimization framework for surfactant-enhanced

remediation of DNAPL contaminations. Journal of Contaminant Hydrology, 86, 3-4, 176-194.

PHT3D

Prommer, H. ; Barry, D.A. ; Davis, G.B. (2002). Modelling of physical and reactive processes during biodegradation of a hydrocarbon plume under transient groundwater flow conditions. Journal of Contaminant Hydrology, 59, 1-2, 113-131.

SIMUSCOPP

Emonet, A. ; Buès, M.A. ; Oltean, C. ; Bour, O. ; Le Thiez, P. (2002). Migration of trichloroethylene in a homogeneous porous medium. 2D numerical study. Developments in Water Science, 47, 209-216.

PHAST

Jakobsen, R. ; Cold, L. (2007). Geochemistry at the sulfate reduction–methanogenesis transition zone in an anoxic aquifer—A partial equilibrium interpretation using 2D reactive transport modeling. Geochimica et Cosmochimica Acta, 71, 8, 1949-1966.